

**НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ  
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ імені ІГОРЯ  
СІКОРСЬКОГО»**

**Фізико-математичний факультет  
Кафедра загальної фізики та фізики твердого тіла**

---

«На правах рукопису»

УДК 621.38.0296

«До захисту допущено»

Завідувач кафедри

Віталій КОТОВСЬКИЙ

(підпис)

(ініціали, прізвище)

“ \_\_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

**Магістерська дисертація  
на здобуття ступеня магістра  
за освітньо-науковою програмою  
«Комп’ютерне моделювання фізичних процесів»  
зі спеціальності 104 – «Фізика та астрономія»**

на тему: **«Термічна нестійкість нанодротів з кристалічною  
гексагональною структурою»**

Виконав: студент VI курсу, групи ОФ-81мн

(шифр групи)

Сингаївський Віталій Вікторович

(прізвище, ім’я, по батькові)

(підпис)

Науковий керівник проф., д.ф.-м.н., Горшков В’ячеслав Миколайович

(посада, науковий ступінь, вчене звання, прізвище, ім’я, по батькові)

(підпис)

Рецензент проф., д.ф.-м.н., Решетняк Сергій Олександрович

(посада, науковий ступінь, вчене звання, прізвище, ім’я, по батькові)

(підпис)

Засвідчую, що у цій магістерській  
дисертації немає запозичень з  
праць інших авторів без  
відповідних посилань.

Студент \_\_\_\_\_

(підпис)

Київ – 2020 року

## **Анотація**

На магістерську дисертацію студента 2 курсу магістерського рівня,  
групи ОФ-81мн, ФМФ, НТУУ «КПІ ім. І.Сікорського»

Сингаївського Віталія Вікторовича

На тему: **«Термічна нестійкість нанодротів з кристалічною  
гексагональною структурою»**

Керівник професор Горшков В.М.

У статті представлена комп'ютерна модель розпаду нанодроту з гексагональною структурою решітки. Використовувана модель Монте-Карло дозволяє на якісному рівні дослідити основні етапи структурних перетворень, які відбуваються в нанопроводах з різною орієнтацією. Було досліджено нестабільність нанородів. Враховується динаміка поверхневих частинок кластера, які з різним ступенем вірогідності можуть змінювати своє положення при переході в сусідні вакансії решітки або відриватися від поверхні. Дослідження показали, що класична модель Ніколса-Маллінза часто не дає точних результатів, оскільки вона не враховує роль пари, що утворюється атомами, відірваними від поверхні нанопроводу. Транспорт вільних атомів від однієї зони нанопроводу до іншої суттєво змінює динаміку процесу розпаду. У цій роботі показано, що залежно від орієнтації нанопроводу та параметрів системи швидкість фрагментації нанопроводу та довжина хвилі розвинених збурень можуть суттєво змінюватися.

Анізотропія поверхневої енергії визначає довжину збурень нанопроводу, що розвиваються, залежно від орієнтації. Дійсно, роль пару та анізотропії може дещо вплинути на кількість крапель та час розриву в деяких випадках. Однак нанопровідники з гексагональною структурою решітки наочно демонструють особливості прояву їх кристалічної структури: залежно від орієнтації може бути збуджена або «короткохвильова», або «довгохвильова» модуляція поперечного перерізу нанопровідника.

**Підпис керівника** \_\_\_\_\_

## **Summary**

At the master's dissertation of a student of 2nd course of the master's degree,  
group OF-81mn, FMF, NTUU "Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute"

Synhaivskyi Vitalii Vicktorovych

On the theme: **"Thermal instability of nanowires with crystalline hexagonal structure"**

The academic advisor is professor Gorshkov V.M.

The paper presents a computer model of the nanowire break-up process with a hexagonal lattice structure. The used Monte Carlo model allows to investigate at a qualitative level the main stages of structural transformations that occur in nanowires with different orientations. The instability of the nanorods was studied. The dynamics of the surface particles of the cluster is taken into account, which with different degrees of probability can change their position when moving to adjacent lattice vacancies or come off the surface. Studies have shown that the classical Nichols-Mullins model often does not give accurate results because it does not take into account the role of the vapor formed by atoms detached from the surface of the nanowire. The transport of free atoms from one zone of the nanowire to another significantly changes the dynamics of the break-up process. In this work, it is shown that depending on the orientation of the nanowire and the parameters of the system, the fragmentation rate of the nanowire and the wavelength of the developed perturbations can vary significantly.

The anisotropy of the surface energy density determines the length of the developing perturbations of the nanowire depending on orientation. Indeed, the role of vapor and anisotropy of may slightly affect the number of droplets and the breakup time in some cases. However, nanowires with a hexagonal lattice structure clearly demonstrate the features of the manifestation of their crystal structure: depending on orientation, either 'shortwave' or 'longwave' modulation of the nanowire cross section can be excited.

**Signature of the head**

---

**Національний технічний університет України**  
**«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»**

**Фізико-математичний факультет**  
**Кафедра загальної фізики та фізики твердого тіла**

Рівень вищої освіти – другий (магістерський)

Спеціальність – 104 «Фізика та астрономія»

Освітньо-наукова програма «Комп'ютерне моделювання фізичних процесів»

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри

Віталій КОТОВСЬКИЙ

(підпис)

(ім'я, прізвище)

«\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

**ЗАВДАННЯ**

**на магістерську дисертацію**

студенту Сингаївському Віталію Вікторовичу  
(прізвище, ім'я, по батькові)

**1. Тема дисертації** “Термічна нестійкість нанодротів з кристалічною гексагональною структурою”, **науковий керівник дисертації** Горшков В'ячеслав Миколайович, проф. д. ф.-м. н., затверджені наказом по університету від \_\_\_\_\_

**2. Термін подання студентом дисертації** \_\_\_\_\_

**3. Об'єкт дослідження** нанодрооти та наночастинки з гексагональною структурою кристалічної ґратки.

**4. Предмет дослідження** перебіг фізичних процесів розпадів нанодротів та їх нестійкість.

**5. Перелік завдань, які потрібно розробити**

1. Опрацювати наукову статтю « Diffusive growth of metallic nano-particles: numerical investigations and different shape formation rules» (V. Gorshkov, V. Privman, A. Zavalov).
2. Опрацювати наукову статтю «Kinetic Monte Carlo Model of Breakup of Nanowires into Chains of Nanoparticles» (V. Gorshkov, V. Privman).
3. Опрацювати наукову статтю «Restructuring and Breakup of Nanowires with the Diamond Cubic Crystal Structure into Nanoparticles» (Vyacheslav N. Gorshkov, Vladimir V. Tereshchuk and Pooya Sareh).
4. Опрацювати наукову статтю «Diversity of anisotropy effects in the breakup of metallic FCC nanowires into ordered nanodroplet chains» (Vyacheslav N. Gorshkov, Vladimir V. Tereshchuk and Pooya Sareh).
5. Ознайомитися з чисельними методами для моделювання структур нанорозмірів на атомному рівні, зокрема, метод молекулярної динаміки, метод Монте-Карло та інші.
6. Написати програму для дослідження розпаду нанодротів різної просторової орієнтації.
7. За допомогою програми VMD виконати побудову тривимірних зображень згідно даних обчислень
8. Проаналізувати нестійкість нанодротів з гексагональною структурою ґратки з урахуванням різних термодинамічних параметрів, встановлених в моделі.

**6. Перелік графічного (ілюстративного) матеріалу:** зображення нанодротів, отриманих шляхом комп'ютерного моделювання, наночастинок та схему розташування атомів у кристалічній решітці.

**7. Орієнтований перелік публікацій:** “Динаміка атомів нанокластерів з гексагональною ґраткою. Science without boundaries International internet conference”.

**8. Консультанти розділів дисертації\***

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		завдання видав	завдання прийняв

**9. Дата видачі завдання 02.09.2019.**

**КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН**

№ з/п	Назва етапів виконання магістерської дисертації	Строк виконання етапів магістерської дисертації	Примітка
1	Проходження інструктажу з техніки безпеки та охорони праці	02.09.2019	виконано
2	Ознайомлення з місцем роботи	05.09.2019	виконано
3	Вивчення літературних джерел, складання огляду літератури	09.09.2019 - 04.10.2019	виконано
4	Пошук і добір фактичних матеріалів, їх групування	07.10.2019 - 01.11.2019	виконано
5	Створення моделі досліджень	04.11.2019 - 25.12.2019	виконано
6	Наукові дослідження за темою МД	13.01.2020 - 27.03.2020	виконано
7	Аналіз отриманих результатів	30.03.2020 - 17.04.2020	виконано
8	Підготовка розділів МД на основі отриманих даних по темі МД	03.02.2020 – 28.02.2020	виконано
9	Підготовка звіту з МД та оформлення презентацій до захисту	02.03.2020 - 05.03.2020	виконано
10	Надання роботи на перевірку керівнику МД	05.03.2020	виконано
11	Отримання відгуку від керівника МД	09.03.2020 - 13.03.2020	виконано
12	Перевірка МД на плагіат	06.05.2020	виконано
13	Формування плану публікацій по темі МД або документів по впровадженню	06.05.2020 - 09.05.2020	виконано

	(лист з підприємства або подання проекту впровадження в «КПІ ім. Ігоря Сікорського»)		
14	Подання МД на рецензію	11.05.2020	виконано
15	Здача МД на нормо-контроль (додержання вимог до оформлення МД)	12.05.2020	виконано
16	Попередній захист МД	13.05.2020	виконано
17	Виправлення матеріалу МД згідно з зауваженнями комісії на попередньому захисті	13.05.2020-18.05.2020	виконано
18	Здача МД (друкований та електронний варіанти), Відгуку та Рецензії на кафедру загальної фізики та ФТТ	18.05.2020	виконано
19	Відсилання анотації МД на сайт кафедри загальної фізики та ФТТ	19.05.2020	виконано
20	Остаточний захист МД	22.05.2020	виконано
21	Відсилання матеріалів МД у бібліотеку «КПІ ім. Ігоря Сікорського» та сайт кафедри загальної фізики та ФТТ	22.05.2020	виконано

## РЕФЕРАТ

### Термічна нестійкість нанодротів з кристалічною гексагональною структурою

**Актуальність теми:** у наш час металеві та напівпровідникові нанопроводи привертають значну увагу завдяки своїм корисним фізичним та хімічним властивостям. Зокрема, механічні та електричні властивості золотих нанопроводів призвели до їх використання для виявлення біоелектричного сигналу. У той же час, можливість налаштування ширини зазору в дротах кремнію робить їх придатними для застосування в оптоелектроніці. Більше того, сучасні методи синтезу дозволяють налаштувати періодичність модуляцій нанодроту та анізотропію поперечного перерізу, що дозволяє виготовляти 1D-структури з різною морфологією поверхні. Саме тому, існує необхідність в дослідженні розпаду нанодротів з гексагональною структурою ґратки та порівняння результатів з класичною теорією.

**Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами:** подібні дослідження дозволяють вносити якісні зміни у формування хвилеводів.

**Об'єкт дослідження:** об'єктом досліджень є нанодроти з різними орієнтаціями осей у просторі, окремі кластери нанорозмірів, що утворилися внаслідок дроблення нанониток.

**Предмет дослідження:** предметом дослідження є нестійкість нанодротів та їх схильність до розпаду, вплив термодинамічних параметрів на фрагментацію нанодротів

**Мета роботи:** розробка програмного забезпечення для розрахунку динаміки розпаду нанодротів з гексагональною кристалічною решіткою, порівняння отриманих результатів з класичною теорією.

**Методи дослідження:** в роботі застосовано модель Монте-Карло, яка чудово підходить для розрахунку атомної динаміки. Окрім цього, для



проведення аналізу даних використовуються допоміжні програми, як, наприклад, VMD.

**Задачі дослідження:** дослідити перебіг розпаду нанодротів та з'ясувати залежності результатів від ряду факторів: температурних режимів, розмірів нанодроти, радіусу та напрямку.

**Наукова новизна одержаних результатів:** методом Монте-Карло на атомному рівні досліджено основні стадії структурно-енергетичних перетворень, що відбуваються в нанодротах різних форм, розмірів і концентрації вільних атомів при різних температурах. Існуюча теорія є недосконалою. Вона не може цілісно описати картину процесів розпаду нанодротів, оскільки не враховує роль пару.

**Практичне значення одержаних результатів:** результати досліджень можуть виявитися корисними для забезпечення безперебійного функціонування пристроїв на основі нанодротин та ланцюгів з наночастинок.

**Апробація результатів дисертації:** отримані результати були представлені в науковій статті.

**Публікації:** Динаміка атомів нанокластерів з гексагональною ґраткою. Science without boundaries International internet conference.

**Ключові слова:** динаміка атомів, метод Монте-Карло, нанодроти, розпад нанодротів, дифузія, наноматеріали

**В роботі наведено:** використаної літератури – 61, сторінок – 80, рисунків – 35, таблиць – 0.

## ABSTRACT

### **Thermal instability of nanowires with crystalline hexagonal structure**

**Actuality of theme:** Nowadays, metallic and semiconductor nanowires draw considerable attention due to their beneficial physical and chemical properties. Specifically, mechanical and electrical properties of gold nanowires have led to their exploitation for bioelectrical signal detection. At the same time, the possibility of tuning the band gap width in silicon nanowires makes them particularly suitable for optoelectronics applications. Moreover, modern methods of nanowire synthesis make it possible to tune the diameter-modulation periodicity and cross-sectional anisotropy of nanowires, which allows the fabrication of 1D-structures with different surface morphologies. Therefore, there is a need to study the decay of nanowires with a hexagonal lattice structure and compare the results with classical theory.

**Connection of work with scientific programs, plans, topics:** such researches allow making qualitative changes in formation of waveguides.

**Object of research:** the object of research is nanowires with different orientations of axes in space, separate clusters of nanoscale, formed as result of fragmentation of nanowires.

**Subject of research:** the subject of research is the instability of nanowires and their tendency to decay, the influence of thermodynamic parameters on the fragmentation of nanowires

**Purpose:** development of software for calculating the dynamics of nanowire decay with a hexagonal crystal lattice, comparison of the obtained results with the classical theory.

**Research methods:** the Monte Carlo model used in the work, which is perfectly suitable for calculating atomic dynamics. In addition, utilities such as VMD used to analyze the data.

**Objectives of the study:** to investigate the course of nanowire decay and to determine the dependence of the results on a number of factors: temperature regimes, nanowire size, radius and direction.

**Scientific novelty of the obtained results:** the main stages of structural and energy transformations occurring in nanowires of different shapes, sizes and concentrations of free atoms at different temperatures have been studied by the Monte Carlo method at the atomic level. The existing theory is imperfect. It cannot comprehensively describe the picture of nanowire decay processes because it does not take into account the role of steam.

**Practical significance of the obtained results:** the results of research can be useful to ensure the smooth operation of devices based on nanowires and chains of nanoparticles.

**Approbation of dissertation results:** the obtained results presented in a scientific article.

**Publications:** Dynamics of nanocluster atoms with a hexagonal lattice. Science without boundaries International internet conference.

**Keywords:** atom dynamics, Monte Carlo method, nanowires, nanowire decay, diffusion, nanomaterials.

**The article contains:** used literature – 61, pages – 80, pictures – 35.

# ЗМІСТ

ВСТУП.....	14
Розділ I. ВЛАСТИВОСТІ НАНОСТРУКТУР І МЕТОДИ ЇХ ДОСЛІДЖЕННЯ	17
1.1 Нанотехнології та властивості наноматеріалів.....	17
1.2 Основні терміни .....	19
1.3 З історії нанонауки .....	22
1.4 Застосування нанотехнологій і наноматеріалів.....	26
1.4.1 Застосування в медицині .....	27
1.4.2 В машинобудуванні.....	28
1.4.3 В електроніці.....	29
1.4.4 В інформаційних технологіях .....	30
1.4.5 В енергетиці .....	30
1.4.6 В сільському господарстві.....	31
Висновок до I -го розділу .....	33
Розділ II. МЕТОДИ МОДЕЛЮВАННЯ НАНОСТРУКТУРНИХ ОБ'ЄКТІВ.....	34
2.1 Метод наукового дослідження – моделювання.....	34
2.2 Методи моделювання наноматеріалів .....	35
2.3 Метод молекулярної динаміки .....	36
2.4 Нелінійні моделі суцільних середовищ.....	37
2.5 Метод Монте-Карло .....	38
Висновки до II -го розділу.....	40
Розділ III. МОДЕЛЬ ЕКСПЕРИМЕНТУ ТА РЕЗУЛЬТАТИ ДОСЛІДЖЕНЬ.....	41
3.1 Класична теорія розпаду нанодротів .....	41
3.2 Чисельна модель експерименту .....	45

3.3 Розпад дротів з гексагональною кристалічною ґраткою.....	50
3.3.1 Розпад дроту з орієнтацією [001].....	50
3.3.2 Розпад дроту з орієнтацією [010].....	56
3.3.3 Розпад дроту з орієнтацією [100].....	62
3.3.4 Розпад дроту з орієнтацією [111].....	68
Висновки до III -го розділу .....	71
ВИСНОВКИ.....	72
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....	74

## ВСТУП

Бурхливий розвиток електроніки, що приводить до постійної мініатюризації елементів інтегральних мікросхем, ставить перед фізиками нові завдання. Зокрема, з'являється необхідність створення провідників надмалих струмів, а також наноструктур з незвичайними магнітними й електронними властивостями. Подібними властивостями володіють металеві наноструктури, такі як нанодроти. [1] Нанодроти і композити на їх основі привертають до себе увагу не тільки своїми незвичайними механічними і електрофізичними властивостями, а й різноманітністю перспектив практичного застосування. В даний час роботи обмежуються, в основному, фундаментальними дослідженнями. [3] Обмеження зумовлені, зокрема, через складність маніпулювання об'єктами такого масштабу. Робота по отриманню та дослідженню структури та різних варіантів застосування нанодротів є актуальним питанням сучасної науки. [2]

Металеві нанопроводи застосовуються у галузі наноелектроніки, оптоелектроніки та у наномеханічних пристроях. [4][5] Вони також використовуються в композиційних матеріалах у вигляді арматури для забезпечення їх високої міцності та невеликої ваги, використовуються як надпровідники, а також – як допоміжні матеріали для покращення тунельних та атомно-силових мікроскопів. [6-8] Поширене застосування металевих нанодротів змусило винахідників глибше досліджувати їх властивості, в тому числі, досліджувати особливості розпаду подібних наноструктур. [9]

В ході виконаних робіт проведено чисельне дослідження тривимірної моделі дифузійного розпаду нанодроту з гексагональною структурою решітки, враховуючи різні температурні показники. Робота включає дослідження двох режимів у системі «нанодріт – навколишнє середовище». Відслідковується динаміка поверхневих атомів, що з різним ступенем ймовірності можуть змінювати своє положення, переміщуючись в сусідні вакансії кристалічної

решітки, відриватися від поверхні та ставати «вільними». Перший випадок передбачує ймовірність відривання атомів з поверхні дроту та утворення «кожуху з пару» навколо нього, звідки в подальшому відбувається осадження частинок на поверхню. В іншому випадку – виникнення пару блокується. Результати, отримані в ході досліджень показують, що існують фундаментальні важелі впливу на процес дроблення та формування нанокраплин. Показано, що в залежності від орієнтації проводу, параметрів системи, змінюється швидкість фрагментації нанодроту та число утворених «крапель». Зміна форми дроту може контролюватися зміною температури та концентрацією вільних атомів у «кожусі» навколо нього.

Розпад наноструктур – явище, якому приділяють чималу увагу в галузі наноелектроніки, адже результати досліджень використовують для вдосконалення та покращення новітніх розробок. Актуальність розглядуваної теми: шляхом контролювання процесами розпаду нанодроту, можна вирощувати нові структури нанорозмірів з відмінними від початкового зародку властивостями. Темою даного дослідження є вивчення особливостей процесу руйнування нанодроту та утворення ланцюжку з нанокраплин. Подібні дослідження дозволяють вносити якісні зміни у формування хвилеводів, що широко використовуються в наноелектроніці. Проте, отримання хвилеводів – процес складний у реалізації та керуванні.

Аналогом дорогих та складних експериментів з дослідження розпаду нанодротів є метод математичного моделювання. Математичне моделювання завжди було актуальним при вивченні механічних властивостей матеріалів з урахуванням їх структури, оскільки завдяки ньому можна відслідковувати кількісні залежності макроскопічних характеристик деформування, міцності і руйнування матеріалу в залежності від параметрів системи. [10]

Згідно з дослідженнями, представленими в «J. Appl. Phys., December 2017» професором Горшковим Вячеславом Миколайовичем, прослідковується відмінність протікання процесів розпаду нанодротів з різними кристалічними решітками. [11] У роботі «Long-term stability of Cu surface nanotips» наведені результати, що отримані за допомогою комп'ютерної моделі. Представлена модель Монте-Карло відтворює процес дифузії атомів, в ній розглядається наноструктурний об'єкт з гексагональною будовою кристалічної ґратки. Досліджується стабільність нанопроводу та вираховується середній час життя нанодротів в різних температурних режимах. [12]



## **Розділ I. ВЛАСТИВОСТІ НАНОСТРУКТУР І МЕТОДИ ЇХ ДОСЛІДЖЕННЯ**

### **1.1 Нанотехнології та властивості наноматеріалів**

Пріоритетним напрямком розвитку науки і техніки є дослідження та розробка нових матеріалів, хімічних продуктів, що відповідають різним потребам розвитку суспільства, потребам охорони навколишнього середовища. Саме тому, аби забезпечити ці потреби, одним із пріоритетних завдань стала розробка наукових основ і практичних рекомендацій в області синтезу і конструювання принципово нових хімічних продуктів, нових перспективних матеріалів нанорозмірів, що відповідають світовим вимогам. Вони повинні бути радіаційностійкими, біосумісними, надпластичними, композиційними наноматеріалами. Використовують ці матеріали для медикобіологічних цілей, прогресивних розробок електронної техніки та інше [14].

Вивчення наноматеріалів, як напрямок нанотехнологій, базується на кількох фундаментальних і прикладних науках. Основні серед яких: фізика, хімія, біологія. У точці перетину даних наук знаходяться кілька інтеграційних напрямків: квантова теорія [15-17] (описує способи поведінки і взаємодії елементів наноструктур в діапазоні нанометрів), фізичне матеріалознавство (точніше його частина, що вивчає властивості наноматеріалів), статистична фізика і хімія (оскільки закони поведінки матерії купують не детермінований, а імовірнісний характер), хімічний синтез, біохімія та молекулярна біологія (описують наноструктури біологічного походження, хімічні процеси синтезу наноструктур, що протікають в самих наноструктурах). Сучасна методологія експериментальних досліджень передбачає наявність моделей (в ідеалі – комп'ютерних моделей, що повністю відтворюють реальну картину)

досліджуваних структур, а також методів отримання інформації про властивості та структуру об'єктів, що моделюються [18].

Наноструктури та нанодроти привертають до себе увагу завдяки своїм незвичайним механічним і електрофізичним властивостям, а також різноманітністю перспектив практичного застосування [19]. В даний час роботи обмежуються в основному фундаментальними дослідженнями. Це відбувається, зокрема, через складність маніпулювання об'єктами такого масштабу. Робота по отриманню та дослідженню наноструктур та їх властивостей є одним з найбільш актуальних завдань сучасної науки [20,21].

Дослідження властивостей нанорозмірних матеріалів і розробка технічних програм на їх основі входять до важливого розділу фізики конденсованого стану та фізичного матеріалознавства. Можливості синтезу і управління функціональними властивостями на рівні окремих молекул або кластерів привели до того, що вивчення наноструктур стало актуальним як в практичному, так і теоретичному рівнях. По суті, інтерес дослідників змістився до вивчення фізичних об'єктів, що лежать на стику класичної та квантової фізики [22-27]. Число взаємодіючих частинок в цих об'єктах (магнітні сплави, вуглецеві нанотрубки, нанокраплини рідкого гелію, класичні та квантові нанорозмірні структури, металеві нанопідкладки та дроти) порівняно невелике – кілька десятків або сотень.

Для опису таких систем необхідна розробка методів дослідження локальної мікроструктури на атомному рівні (ближній порядок), що враховують як класичні, так і квантові молекулярні кореляції. Розмірний ефект – загальна назва залежності питомих показників матеріалу від розміру його частинок. Розмірні ефекти розподіляються на фізичні і хімічні. Зокрема, вони характеризуються термодинамічними, механічними, транспортними, оптичними та магнітними властивостями, реакційною здатністю.

Зі зменшенням розміру елементів значно зростає роль поверхневих сил (частка поверхневих атомів збільшується від декількох відсотків до декількох десятків відсотків). Властивості поверхневого розділу атомів в нанометровому

діапазоні можуть сильно відрізнятися від властивостей матеріалів макросвіту. Розмір елементів наноструктур порівнюємо з характерними розмірами деяких фізичних явищ (наприклад, з довжиною вільного пробігу в явищах переносу); розмірні ефекти в наноструктурах можуть мати квантовий характер [28].

Одними з основних складових науки, що займається вивченням властивостей наноматеріалів та застосуванням їх у нанотехнологіях є наступні перелічені:

- 1) дослідження фундаментальних фізичних властивостей наноструктурних матеріалів;
- 2) створення сучасних технологій та приладів з використанням нанооб'єктів;
- 3) застосування природніх матеріалів, що відносяться до наносвіту;
- 4) застосування матеріалів наносвіту в різних галузях промисловості та інших сферах життєдіяльності, наприклад, в медицині;
- 5) пошук нових методів дослідження;
- 6) розвиток засобів і методів дослідження структури і властивостей наноматеріалів, а також методів контролю та атестації виробів і напівфабрикатів для нанотехнологій.

## **1.2 Основні терміни**

«Нанотехнології» – це методи та засоби отримання наноструктурних об'єктів шляхом контрольованого впливу на процес, контрольованої деформації форми наноматеріалів та їх структурних елементів, розміри яких не перевищують 100 нм. Застосування сукупних методів і прийомів дають змогу отримувати нові форми матеріалів наномасштабу з новими, відмінними властивостями та якостями, які можна застосовувати при створенні сучасних

приладів або застосовувати у важливих галузях промисловості. Поняття «нанотехнологій» включає у себе, в тому числі, і методи діагностики, аналізу поведінкових властивостей матеріалів при зміні параметрів системи, а також опис особливостей об'єктів наносвіту.

«Наноматеріал» – під цим поняттям розуміють матеріали, що складаються зі структурних елементів розмірами не більше ніж 100 нм. В даній роботі розглядається нанодріт з гексагональною структурою кристалічної ґратки. Нанооб'єкти мають відмінні властивості в порівнянні з об'єктами макросвіту, а також – відмінні функціональні на експлуатаційні характеристики. [2]

Nanocable / нанодріт – наноматеріал циліндричної форми заданої довжини. Нанодріт – об'єкт наномасштабу, свого роду проволока або оболонка з визначеною будовою кристалічної структури. [29]

«Наночастки» – окремі фрагменти, що утворюються шляхом вирощування або шляхом дроблення нанониток на окремі краплини. Подібні структури піддаються нанофабрикації. Отримання краплин шляхом розпаду нанодроту – керований процес, що дозволяє створювати об'єкти заданих величин. Розміри краплин варіюються в залежності від будови кристалічної структури решітки, радіуса нанонитки, орієнтації її осі у просторі та термодинамічних показників, що є регульованими.

Як і для більшості нанорозмірних кластерів розміри таких частинок знаходяться в діапазоні від 1 до 100 нанометрів. [2] Наночастинку можна порівняти з великим атомом, якому притаманні дискретні рівні енергії. Зменшення розміру наночастинки впливає на відношення поверхні щодо об'єму. Зі зменшенням розмірів їх відношення зростає. Проявляється домінантність поверхневих властивостей відносно електронних та оптичних. [29]

«Наносистемна техніка» – пристрої або системи, що повністю ґрунтуються на застосуванні наноматеріалів або на їхньому частковому використанні, функціонування подібних систем залежить від властивостей об'єктів наносвіту.

Слід відмітити, що окрім цього, характеристики таких приладів відмінні від аналогів, створених шляхом застосування традиційних методів. [2]

Nanometal / нанометали – частинки оксиду заліза наномасштабу. Це може бути, наприклад, цинк, мідь, титан, золото або срібло чи інші види металів, розмір яких знаходиться в межах від одного до ста нанометрів. Використовуються нанометали у важливих областях людської діяльності – в медицині, біології, приладобудуванні. Наночастинки з металу застосовуються як окремі структурні елементи, або ж покриваються додатковими органічними сполуками, серед яких – декстрини, фосфоліпіди та інші. Використання металевих частинок розмірів «нано» дозволяє робити колоїдні розчини більш стабільними. Перспективний напрямок використання подібних елементів – транспортування ліків через організм людини до безпосереднього місця ураження хворобою.

Nanosystem / наносистема – система, що складається з об'єктів нанорозмірів n-виміру:

- нульовий вимір (0D) відповідає наночастинкам (відповідність квантовим точкам),
- одновимірні структури (1D) – волокна та нанодротинки,
- двовимірні (2D) – наноплівки,
- тривимірні об'єкти (3D) – нанокристаліти або інші матеріали, довжина яких, хоча б для одного з вимірів, знаходиться в межах розмірів, що відповідають нанометровому масштабові.

Наносистема характеризується властивостями нанооб'єктів, що входять до її складу та взаємодією між ними. Перспективний напрямок дослідження – вплив систем з n-вимірних об'єктів наномасштабу на організм людини, дослідження перебігу процесів впливу. [29]

Нанодіагностика – система заходів та методів спрямована на проведення досліджень, метою яких є вивчення морфології наноматеріалів, структурних

особливостей. Свою увагу привертають в тому числі механічні, електричні, оптичні, біологічні характеристики таких матеріалів. Нанодіагностика включає в себе і вимірювання метричних параметрів з дуже високою точністю. Для проведення діагностики застосовується техніка з наноточністю.

Нанонаука – сукупність знань, що застосовується для дослідження властивостей нанооб’єктів, для передбачення закономірностей та перебігу процесів, що відбуваються в системі. Нанонаука є досить важливою у наш час, оскільки нові відкриття можуть бути революційними та зробити значний внесок у розвиток медицини на нанорівні, внести якісні корективи у створення високотехнологічного обладнання. Дослідження властивостей наноматеріалів дає поштовх до застосування здобутих знань у галузях виробництва та навіть охорони здоров’я [34]

### 1.3 З історії нанонауки

Префікс «нано» позначається грецьким префіксом ‘dwarf’, що означає «карлик» або щось дуже мале, розмірами тисячі мільйонів метра ( $10^{-9}$  м). Слід розрізняти нанонауку та нанотехнологію. Нанонаука – це система знань, що застосовується для вивчення структур на атомному рівні для об’єктів, розміри яких не перевищують 100 нанометрів. Технологія, що передбачає використання подібних матеріалів в практичних цілях, в сучасних приладах або в галузях промисловості, називається нанотехнологією [35]. Для порівняння: волосинка людини має товщину 60 000 нм, а подвійна спіраль ДНК має радіус 1 нанометр, рис. 1.1. [36] Розвиток нанонауки можна простежити ще в часи греків, за життя Демокріта, в V столітті до нашої ери, коли вчені розглядали питання про те, чи є матерія неперервною, і таким чином нескінченно ділиться на більш дрібні

шматки, або складається з дрібних, неподільних і незнищених частинок, які зараз називаються атомами. [37]

Нанотехнології – технології, що передбачають роботу з речовиною на атомному рівні. Традиційні методи виробництва приладів полягають у використанні фрагментів матеріалів чи речовини, що складається з мільярдів, а то і більше, атомів. Самі точні прилади, виготовлені людиною до цього часу, на атомарному рівні виглядають як безладна мішанина. Проте прилади, основані на нанотехнологіях володіють наноточністю. Етап переходу від маніпуляцій з речовиною до керування процесів на атомному рівні став якісним стрибком, що забезпечив безпрецедентну точність і ефективність приладів [30].

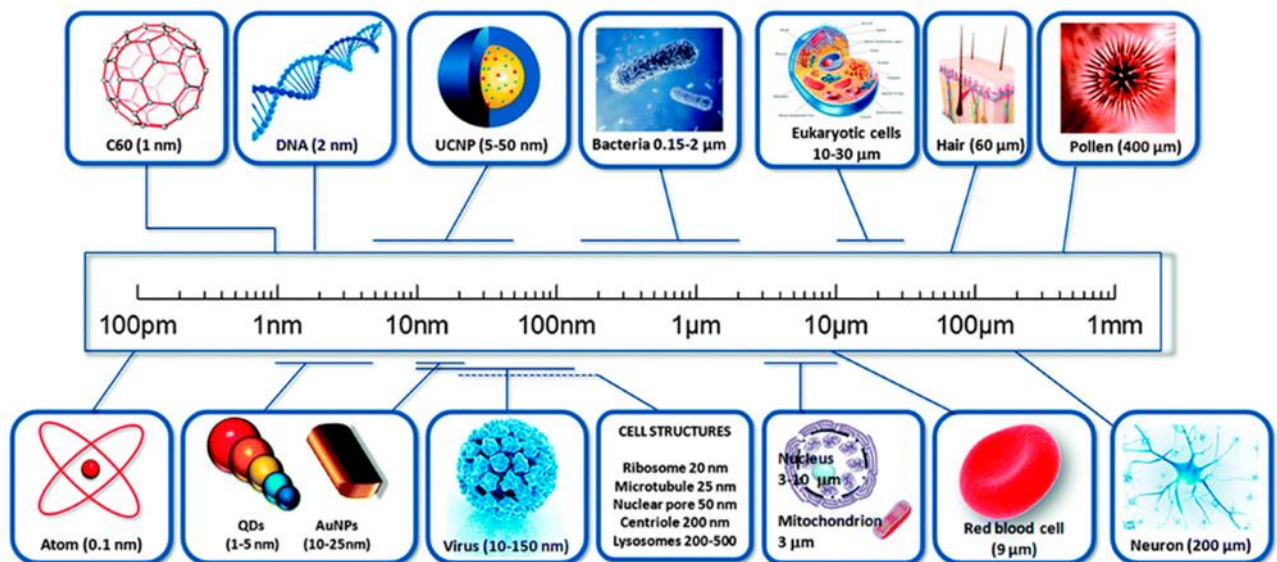


Рисунок 1.1 – Порівняння розмірів наноб'єктів. [36]

Норіо Танігучі – японський фізик, який вперше використав термін нанотехнологія. Датується ця подія 1974 роком. Фізик Норіо запропонував дати таку назву технологіям, що використовували механізмами, розмір яких був порядку нанометрів. 1980 року термін використовує Е. К. Дрекслер у своїй праці «Engines of Creation: The Coming Era of Nanotechnology». Через шість років по тому, він використовує цей термін в своїй докторській дисертації, що була виконана при Массачусетському технологічному інституті. Дрекслер

використовує назву «нанонаука» для описання нової галузі, що займається дослідженням матеріалів нанорозмірів.

Інтерес розвитку даного напрямку підсилювався потребами того часу, виникла необхідність у мініатюризації. Зокрема, передовими галузями, в яких використання нанотехнологій зробило б революційний прогрес були космонавтика, галузь інформаційних технологій та комунікацій. [34] 1959 року нобелівським лауреатом Річардом Фейнманом під час виступу з лекцією було зроблено припущення, що в майбутньому, людство навчиться синтезувати необхідні матеріали шляхом маніпуляцій окремими атомами.

1981 року фірма IBM представляє тунельний мікроскоп – перший інструмент, що дозволив проводити згадуванні Фейнманом маніпуляції над атомами. Тунельний мікроскоп дозволив не тільки слідкувати за переміщеннями атомів, а й проводити певні операції над ними – піднімати, змінювати їхнє положення. Таким чином, людство зробило перші кроки до синтезу необхідних їй структурних елементів шляхом проведення маніпуляцій над окремими атомами і отримало змогу будувати наноструктурні об'єкти на атомістичному рівні. Завдяки новим відкриттям і нанотехнологіям людство отримало змогу:

- створювати електронні схеми, елементами яких можуть бути структури лише декількох атомів;
- створювати механізми наномасштабу та використовувати задля покращення функціональних властивостей сучасних приладів;
- вирощування нанооб'єктів шляхом маніпуляцій над атомами.

Пріоритетним напрямком розвитку нанотехнологій, в якому можуть бути досягнуті найбільш швидкі і значні практичні результати, є дослідження та розробка нановуглецевих матеріалів: фулеренів, вуглецевих нанотрубок і композиційних наноалмазних матеріалів, хвилеводів. Хвилеводи можна створити за рахунок дроблення нанодроту на ланцюжок з окремих наночастинок [31-33].



Нановуглецевим компонентам притаманна металева провідність і високотемпературна надпровідність. Розглядувані структури можуть виступати в ролі діелектриків, напівпровідників або надпровідних сполук. Вони використовуються в дисплеях з низьковольтною автоелектронною емісією, у водневій енергетиці як контейнери для зберігання водню, в нанoeлектроніці. Крім того, при отриманні вуглецевих матеріалів з плазми, спектр метастабільних станів і відповідних їм властивостей може бути значно розширений. Це відкриває нові можливості для створення вуглецевих матеріалів для цілей мікроелектроніки, механіки, оптики, медицини.

Нанотехнології широко використовуються в наш час. Наприклад, у харчовій промисловості використовуються наноматеріали для збільшення терміну придатності продуктів та для збереження поживних речовин. Окремі наносполуки виявляють антимікробну дію, вони є ефективними проти бактерій, що переносяться в їжі. Низка наноматеріалів в даний час використовується для діагностичних цілей в харчовій промисловості, вони використовуються як датчики для відслідковування якості та безпеки харчових продуктів [39].

Використовуються такі матеріали і для створення нового покоління сонячних батарей, нових систем зберігання водню та інше. Однак, найбільш значні досягнення в галузі нанотехнологій припадають на широке поле біомедицини. Оскільки нанотехнології дозволяють проводити операції з високою точністю.

Нещодавні досягнення в галузі фізики, хімії та матеріалознавства дали можливість відкрити багато наноматеріалів з унікальними властивостями, які, як очікується, покращать лікування злоякісних пухлин. [37] З їхньою допомогою передбачається транспортування ліків через організм людини до місця ураження хвороби. Інноваційні біомедичні програми в даний час використовуються в різних клінічних випробуваннях і в найближчому майбутньому можуть отримати серйозний розвиток в терапії раку та інших хвороб. [29]

## 1.4 Застосування нанотехнологій і наноматеріалів

Посилений інтерес до вивчення наноматеріалів пов'язаний з можливістю отримувати шляхом деформацій або інших змін у системі нові наноструктури, що мають відмінні макрокристалічні, фізико-хімічні властивості. Найбільш приваблива особливість наноматеріалів – можливість регулювати фізичні характеристики матеріалу за рахунок зміни розміру наносистеми. Таким чином, очевидно, що контроль розміру, іноді і форми, наночастинок на рівні атомів може привести до зміни властивостей добре відомих матеріалів і відкрити перед ними можливість використання в нових областях життєдіяльності.

Серед галузей промисловості, де почали широко використовувати матеріали нанорозмірів та їхні сплави, передові позиції посідають біологія, медицина, приладобудування, машинобудування, транспортна промисловість, космічна галузь. Наноструктурні об'єкти використовуються у приладах, де необхідно забезпечити високу стійкість експлуатаційних характеристик прибору в екстримально-складних умовах.

В даний час синтезовані різні типи нанооб'єктів: неорганічні, органічні, змішані з різною морфологією - нанокристали, нановолокона, сплави, дроти, сфери, наночастинки, фулерени, вирощенні кластери на площині та інше. Ці матеріали знаходять широке застосування в різних областях: в електроніці, фармакології, косметичі, медицині, хімічній індустрії (каталіз) та інше. Актуальний напрям використання нанотехнологій – виготовлення кераміки на основі нанопорошків. Головна вимога щодо виготовлення кераміки високої щільності – для нанопорошку повинна бути притаманна слабка агломерація наночастинок. [2].

### 1.4.1 Застосування в медицині

Наномедицина передбачає застосування нанотехнологій, наноматеріалів та наноелектронних біосенсорів у галузях охорони здоров'я та медицини. Медична область застосування нановідкриттів має ряд переваг, що якісно можуть змінити підхід до лікування та профілактики хвороб. За допомогою наномедицини можна на ранніх стадіях діагностувати їхній розвиток, проводити аналіз, профілактику, назначати правильне лікування та впродовж періоду лікування проводити якісне медичне супроводження.

Окремі частинки наномасштабу можуть використовуватися як біомітки або етикетки для тестування, оскільки вони є чутливими до будь-яких негативних впливів на організм. За допомогою нанотехнологій в майбутньому передбачається відтворення та відновлення пошкоджених ділянок людських тканин. Ці, так звані штучно стимульовані клітини, використовуються в тканинній інженерії, що може викликати революційний прорив в області трансплантації органів або штучних імплантатів. Передові біосенсиори з новими можливостями можуть бути розроблені за допомогою карбонових трубок нанорозмірів. [40]

Нанопристрої будуть задіяні для дослідження стовбурових клітин, їх відстеження та відтворення. Самі ж стовбурові клітини модулюються шляхом змішування наноносіїв з біологічними молекулами. Пристрої на основі наноматеріалів можна використовувати як для внутрішньоклітинного доступу, так і для інтелектуальної доставки та зондування біомолекул. Подібні технології мають вагомий вплив у дослідженнях стовбурових клітин та тканинної інженерії, а також відкривають великий потенціал перед біомедициною [41].

Наномедицина – відносно нова галузь науки та техніки. Взаємодіючи з біологічними молекулами в наномасштабі, нанотехнологія розширює поле досліджень та застосування. Застосування ліків в наномасштабі дозволяє використовувати фізичні властивості, відмінні від тих, що спостерігаються в

мікромасштабі. Деякі види нанопрепаратів, які вже були випробувані на мишах, чекають випробувань на людях. Наприклад, використання золотих нанооболонки для діагностики та лікування раку, а також використання ліпосом в якості транспортних засобів для транспортування ліків [42].

Дезінтоксикація препаратами – ще один перспективний напрямок розвитку наномедицини, який вже успішно випробовується. Медичні технології дозволяють використовувати нанопристрої, імплантуючи їх в середину організму. У порівнянні з типовими препаратами, препарати виготовлені за допомогою нанотехнологій діють швидше, потрапляючи у місце ураження, та показують ефективніші результати [43].

#### **1.4.2 В машинобудуванні**

Нанотехнології в машинобудуванні та виробництві є надзвичайно корисними. Вони застосовуються для збільшення терміну експлуатації комплектуючих автомобільних деталей. За допомогою нанотехнологій можна збільшити термін зношування багатьох матеріалів, оскільки наноматеріали виявляють унікальні фізичні та хімічні властивості, що дають змогу проводити інженерні вдосконалення. Вони також володіють кращими магнітними властивостями, поліпшеною механічною активністю та підвищеними оптичними характеристиками. [44]

Нанотехнологічні матеріали почали використовувати для підвищення точності верстатного приладобудування. Адже використання подібних технологій забезпечує можливість проводити вимірювання з наноточністю, які так необхідні для створення ріжучого обладнання. Таким чином, нанотехнології допомагають знизити погрішність обробки матеріалів на рівні нанометрів.

Використання подібних елементів у промисловій галузі поліпшує технічні характеристики автомобільних, верстатних та інших деталей. [18-22]

### 1.4.3 В електроніці

Нанотехнології вже використовуються в електронній промисловості. Багато приладів сучасної електроніки успішно працюють на основі їх. Електроніка та оптоелектроніка завдяки розвитку нанотехнологій отримала можливість покращити радіолокаційні системи, які базуються на властивостях нановолокон та інших наноструктур. Для покращення радіолокаційної техніки використовують фазоантенні решітки та транзистори з високими оптичними характеристиками. Наноматеріали застосовуються для створення фотоприймачів, інжекційних лазерів, тепловізорних систем прицілювання, та інше. [45]

Так, наприклад, розмір нових комп'ютерних мікропроцесорів сягає десятків нанометрів (до 100 нм). Менші розміри передбачають зростання швидкодії та можливостей обробки даних. Ці досягнення, безперечно, допоможуть створити удосконалені версії комп'ютерів. Однак, в найближчому майбутньому цього може виявитися недостатньо. Поточні електронні технології не зможуть задовільнити зростаючий попит на нові мікропроцесори.

Мікросхеми виготовляють літографічним способом або способом травлення. За цією технологією зонд буквально записує над поверхнею мікросхему. Цей спосіб побудови мікросхем має обмеження в розмірах, оскільки якщо розміри такого об'єкту сягають менше приблизно 22 нанометрів, то виникають помилки, що унеможливають виготовлення мікросхем. [46]

#### **1.4.4 В інформаційних технологіях**

Нанотехнологічна інформатика об'єднує два наукових напрямки: інформатику та нанотехнології. Саме злиття цих двох напрямків дало поштовх розвитку нового – інформаційних технологій з використанням наноматеріалів. До складу нанотехнологічної інформатики відносяться чотири основні розділи:

- зберігання, обробка, управління даними;
- моделювання наноструктурних систем, нанодротів зокрема;
- проектування нанооб'єктів;
- обмін даними досліджень в галузі нанотехнологій.

Одним із важливіших завдань даного напрямку є розробка інформаційних систем, що дозволяють проводити вилучення інформації, її перевірку на коректність шляхом підключення у визначену інформаційну систему. Важливою ланкою є також аналіз наявної інформації з метою практичного використання. Нанотехнологічна інформатика включає в себе системи, що задіяні для розробки та опису характеристик наноматеріалів, системи проектування наносистем, розробку вдосконалених процесів виробництва наноприладів і механізмів, що дозволяють забезпечити охорону навколишнього середовища та можуть бути задіяні в інших галузях. [47]

#### **1.4.5 В енергетиці**

Використання наноматеріалів в енергетиці (в атомній в тому числі) необхідне задля модернізації та покращення існуючих технологій та виготовлення нових елементів систем подачі палива або інших елементів конструкційного призначення. Матеріали нанорозмірів підвищують

ефективність обладнання та сприяють розвиткові альтернативних напрямків енергетики. Тепловиділяючі та нейтронопоглинаючі системи ядерних реакторів містять окремі елементи з наноматеріалів. Датчики виготовленні з використанням нанотехнологій допомагають контролювати зберігання і переробку палива з ядерних реакторів.

Застосування нанотехнологій або наноматеріалів у галузі енергетики є досить поширеним. Зокрема, перспективні розробки: літій-іонні акумулятори, паливні елементи, світлодіоди, ультраконденсатори, елементи сонячних батарей – всі ці теми досить актуальні для сьогодення. Та, на жаль, стрімкому розвиткові заважає велика вартість виробництва у порівнянні зі звичайними технологіями. Тому, часто вибір падає не на їхню користь. [48]

#### **1.4.6 В сільському господарстві**

Використання нанотехнологій може докорінно змінити всю галузь сільського господарства. Так, вони можуть вирішити проблему низької родючості ґрунтів в окремих оброблюваних регіонах. Пряме застосування нанотехнологій у сільському господарстві передбачає виготовлення агрохімікатів, пестицидів, наносенсори та датчиків контролю забруднення земель. Нанотехнології можуть бути застосовані у ветеринарній справі, рибальстві та аквакультурі. Зокрема, з їхньою допомогою можна контролювати дефіцит поживних речовин. На основі наноматеріалів виготовляють добрива, які все частіше використовуються як замітники сипучих добрив, оскільки заміна дозволяє зменшити забруднення ґрунту та води різними агрохімікатами.

Нанотехнології сприяють повільному та стійкому розчепленню поживних речовин, тим самим – зменшувати матеріальні втрати та підвищувати ефективність використання нанодобрив. Нанотехнології забезпечують широкий

спектр застосувань сучасних підходів у галузі живлення рослин задля отримання кращого врожаю. Такі технології конче необхідні в зв'язку зі зростанням популяції людей. Нанодобрива та поживні елементи мають унікальні фізико-хімічні властивості, високу реакційну здатність. Окремо слід відзначити, завдяки нанотехнологіям, з'явилася можливість регульований розмір пор нанодобрив.



## **Висновок до I -го розділу**

Провівши літературний огляд, з'ясовано, що наноматеріали – широко використовуються у багатьох галузях промисловості, медицини, у галузі інформаційних технологій та інших. Вони вирізняються характерними особливостями та вносять якісні зміни у розвиток сучасних приладів та областей, в яких ці прилади використовуються. Тема досліджень наноматеріалів та їх властивостей потребує всебічного розгляду. Таким чином, огляд літератури ще раз підтвердив правильність обраної теми (розпад нанодропинок на окремі краплинки), оскільки виготовлення нових високоточних технологій – гостре питання сьогодення.

## Розділ II. МЕТОДИ МОДЕЛЮВАННЯ НАНОСТРУКТУРНИХ ОБ'ЄКТІВ

### 2.1 Метод наукового дослідження – моделювання

Моделювання можна охарактеризувати як спосіб пізнання, що об'єднує в собі надбання теоретичних та практичних засобів, коли суб'єкт відтворює реальну картину процесу, що відбувається, в комп'ютерній моделі. Модель відповідає особливостям протікання цього процесу та не спотворює результат. Такий метод пізнання дозволяє використовувати здобуту інформацію для подальшого дослідження того чи іншого фізичного процесу як такої, що відповідає дійсності. Коли говорять про моделювання, розуміють етапи створення та реалізації комп'ютерної програми.

Модель – результат моделювання, один із варіантів пізнання. Завдяки моделям можна проводити експериментально складні дослідження, що відображають цілісну картину технологічного процесу. Окремою перевагою моделювання відносно досліджень в лабораторних умовах є можливість швидко отримати результат наукового дослідження. Тобто, в моделі можна встановити параметри швидкості протікання процесу, що допомагає розглядати швидкоплинні явища більш детально і навпаки – зменшити затрати часу на дослідження довготривалих. Створення моделі може стати прекрасним аналогом дорогого експерименту – це одна з переваг даного методу наукового дослідження. [58] Існують наступні види моделей:

1. Абстрактні моделі.
2. Реальні моделі.
3. Інформаційні (комп'ютерні) моделі.

Інформаційні моделі представляють реальність, і в той же час їхня поведінка не залежить від функціонування цієї реальності. Модель – є

інструментом пізнання світу та явищ, які в ньому відбуваються. Дослідник ставить модель між собою та об'єктом досліджень, та має змогу дослідити його особливості, а також – змінити параметри системи та спостерігати за змінами, що відбулися. Необхідність у моделюванні як у методі наукового пізнання залежить від ряду факторів: перш за все слід зрозуміти, чи доцільним є створення моделі, зважаючи на затрати машинного часу, затрати фінансових ресурсів та інших обставин. [59]

## **2.2 Методи моделювання наноматеріалів**

Поряд з теорією і експериментами чільне місце у дослідженні властивостей структур на атомному рівні займає комп'ютерне моделювання. При цьому найбільший інтерес викликає моделювання на атомному рівні. Для молекулярного (атомного) моделювання частіше за все використовують наступні методи: метод молекулярної динаміки, молекулярної механіки, метод Монте-Карло, що широко використовується в статистичній фізиці, квантові методи та методи суцільних середовищ.

Іноді, для отримання більш точних результаті модель молекулярної динаміки використовують у поєднанні з методом Монте-Карло. Однією з проблем моделювання наноструктурних об'єктів є той факт, що класичні закони фізики перестають діяти в межах тих масштабів, якими оперують нанотехнології. Наприклад, рух легких частинок (електронів) може бути описано тільки квантово-механічними законами.

Методом молекулярної механіки проводиться пошук енергетично вигідного положення в просторовій будові молекули, що передбачає пошук локального мінімуму потенційної енергії. За допомогою цього методу розраховується класична траєкторія руху атомів шляхом інтегрування рівняння

руху Ньютона в силовому полі молекули, а метод Монте-Карло, який безпосередньо використовується в дослідницькій роботі, розглядається вся статистична сукупність енергетично вигідних положень атомів. З його допомогою можна також оцінити їх термодинамічні характеристики.

Метод молекулярної механіки застосовують в основному при визначенні оптимальних значень параметрів, що описують молекулярну будову окремих елементів, наприклад, розміри вуглецевих трубок, а також при виявленні місць «виловлювання» потрібних молекул з розчину і їх зв'язування. Нечисленні роботи, що ґрунтуються на застосуванні методу Монте-Карло, стосуються моделювання процесу збирання окремих частин молекулярних механізмів. [60]

## **2.3 Метод молекулярної динаміки**

Метод молекулярної динаміки (далі просто МД) ґрунтується на розрахунку еволюції системи взаємодіючих між собою частинок (атоми, молекули). МД може бути класичною або квантовою. Коректне описання міжатомної взаємодії – одна з умов успішного моделювання динаміки атомів у наноструктурах. Потенційна функція взаємодії атомів описується теоретичними методами, що ґрунтуються на наближеному вирішенні квантово-механічного обчислення енергії кристала. Потенціал взаємодії задається у вигляді деякої функції з набором параметрів, за допомогою яких і вдається реалізувати процес керування системою.

Одна з основних проблем моделі МД – швидкість обчислення результатів комп'ютером. Висока швидкість розрахунків дає можливість реалізовувати моделі для розрахунку більш тривалих експериментів або їхньої більшої кількості, збільшувати обсяг обчислювального апарату, використовувати більш складні та реалістичні потенціали міжатомної взаємодії. З іншого боку,

швидкість обрахунку даних побічно впливає на похибки в комп'ютерних моделях. Ще одна проблема – виникнення похибок під час обчислення траєкторії руху атомів, виникнення побічних непередбачуваних похибок. [2]

Причиною виникнення похибок може бути чисельний метод, який використовується для вирішення рівнянь руху, або причиною можуть слугувати особливості програми, за допомогою якої здійснюються обрахунки: наприклад, окремі значення величин можуть автоматично округлюватися до певного знаку після коми. Створення моделі для описання особливостей нанооб'єктів на атомному рівні виконується в декілька етапів:

1. обрання базису кристалічної решітки,
2. програмування розрахункової комірки,
3. визначення розміру обчислювального апарату,
4. обрання потенціалу взаємодії,
5. апробація потенціалу згідно відомих властивостей матеріалу,
6. визначення "граничних умов",
7. визначення методу і підбір відповідного математичного апарату для опису руху часток. [2]

## **2.4 Нелінійні моделі суцільних середовищ**

Особливість даної моделі в тому, що вона представляє молекулярну систему як суцільне середовище, еволюцію котрої задають безперервними макроскопічними функціями. Завдяки загальним законам збереження отримують рівняння моделі суцільних середовищ (далі просто СС). Матеріальні рівняння та рівняння стану моделі СС визначаються експериментально, або на рівні молекулярного моделювання. Як правило, нелінійність залежності

коефіцієнта дифузії від щільності призводить до нелінійних рівнянь дифузії. Такі моделі є глобальними (в порівнянні з моделями кінетики молекул, Монте-Карло, наприклад) і передбачають врахування необхідних граничних умов.

Моделі СС активно використовують в разі, якщо необхідно описати процеси дифузії частинок нанооб'єктів, зміщення кордонів фазових переходів, зміщення стінок магнітних доменів у відповідних системах. Технологія створення пристроїв накопичення даних на основі фазових переходів передбачає створення багатомасштабної моделі, що відтворюватиме поведінку молекулярної системи.

Використання математичних моделей і обчислювальних машин стає невід'ємною складовою технологічного процесу створення наносистем на рівні молекул (атомів). [61]

## **2.5 Метод Монте-Карло**

Метод Монте-Карло (далі просто МК) є одним з ефективних методів моделювання еволюції наноматеріалів та нанокристалічних об'єктів. МК передбачає чисельний розрахунок траєкторії руху окремих частинок (атомів або молекул) і видає точні результати обрахунку термодинамічних параметрів наносистеми. Дана модель враховує вплив на систему таких параметрів як зміна температури, об'єму, концентрації та енергії взаємодії частинок між собою. Відмінність її від моделі молекулярної динаміки в тому, що замість інтегрування рівнянь Ньютона застосовується моделювання процесів, що відбуваються на основі випадкових величин.

Розглядуваний метод дає можливість оминати енергетичні бар'єри, за необхідності, без додаткових затрат машинного часу. Основний принцип роботи МК полягає у виборі випадкових величин на кожному кроці циклу. Генерації

випадкових величин впливає на результат обчислень. Саме тому, для використання даного способу чисельного обрахунку динаміки частинок в нанокластері необхідно забезпечити ефективність генерації випадкових величин.

Методи Монте-Карло часто використовуються в обчислювальних нанотехнологіях. Проте недоліком МК є швидкість обрахунку, оскільки швидкість виконання програми залежить від кількості атомів у наносистемі. Відповідно зі зростанням розмірів нанокластеру зростає і час чисельних розрахунків. [62]

Якщо говорити про даний метод виходячи з дослідів, які були проведені в ході виконання магістерської дисертації слід сказати, що він добре зарекомендував себе при перевірці висновків різних теорій (чисельний розрахунок різних випадків розпаду нанодроту). Даний метод дозволяє досліджувати властивості системи, як термодинамічні (наприклад, енергію, тиск, ентропію), так і кінетичні (коефіцієнти дифузії, частоти коливань атомів), причому, існує можливість порівнювати динаміку досліджуваних процесів в реальному часі.

Проведення дослідів тільки підтвердило, що головним недоліком методу, в порівнянні з іншими, є великі витрати машинного часу, необхідні для виконання розрахунків. Можливості обчислювальної техніки дозволили використовувати методи комп'ютерного моделювання для дослідження механізмів міграції атомів і трансформації структури при температурно-силових впливах, що потребують більш тривалих і складних комп'ютерних експериментів. [2]

## Висновки до II -го розділу

У даному розділі розглянуто методи, що використовуються для моделювання наноструктур на рівні атомів або молекул. З'ясовано їхні недоліки та переваги. Так, наприклад, метод молекулярної динаміки та метод молекулярної механіки є значно швидшими у порівнянні з іншими моделями. Проте, недоліки в тому, що для їхньої реалізації потрібно емпіричним шляхом підібрати дані для впровадження в модель. За допомогою методу МД можна знаходити локальні мінімуми енергії – це одна з його основних переваг.

Метод Монте-Карло хоч і не є настільки точним як два попередні, проте даний метод наукового дослідження дуже ефективний у разі, коли треба створити модель дифузії атомів, або модель росту наноструктурних об'єктів. МК застосовують для досліджень тих процесів, які є довготривалими та вимагають чималих затрат машинного часу. Перевага методу Монте-Карло – кращі розрахунки термодинамічних характеристик наноструктур. Саме тому, в роботі використовується метод МК.



## Розділ III. МОДЕЛЬ ЕКСПЕРИМЕНТУ ТА РЕЗУЛЬТАТИ ДОСЛІДЖЕНЬ

### 3.1 Класична теорія розпаду нанодротів

В сучасній техніці, при виникненні необхідності застосування наноструктур для створення нових приладів, постає питання їхньої стабільності, адже в порівнянні з макрооб'єктами структури нанорозмірів мінімізують поверхневу енергію з плином часу і можуть розпадатися, причиною чого є сила поверхневого натягу та зміна термодинамічних показників системи. [53]

Яскравий приклад – нестійкість порожнистих радіальних частинок, що зумовлена впливом капілярних сил. Інший приклад – намагання пов'язати процес розпаду нанодротинок з теорією Плато-Релея, яка застосовується для опису розпаду струменів рідини. [54][55] Звісно, досить спокусливо пов'язувати процес дроблення металевого наностержня зі нестабільністю Плато-Релея, що спонтанно розвивається в струменях рідини. Добре відомо, що внаслідок випадкових коливань та / або кінцевих ефектів на рідкому струмені утворюються поверхневі збурення. Для деяких просторових довжин хвиль такі збурення зростають, спричиняючи розпад струменя на окремі краплі. [56] Однак, доволі часто розпад твердих наноструктур описується характеристиками, притаманними саме для цієї теорії.

Плато відомий теоретичними роботами з дослідження нестабільності геометрії циліндричних струменів, а лорд Релей провів розширений аналіз лінійної стійкості нев'язких рідинних струменів проти періодичних збурень. Пізніше Ніколс і Маллінз провели аналогію теорії Плато-Релея відносно збурень у твердих тілах [57]. Вони проаналізували нестабільність циліндричного стержня, припускаючи, що його поверхнева енергія ізотропна відносно синусоїдального радіального збурення, що має вигляд:

$$r = R_0 + \delta \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda} z\right)$$

$R_0$  – початковий радіус;

$\delta$  і  $\lambda$  – відповідно амплітуда і довжина хвилі збурення;

$z$  – координата вздовж осі симетрії стержня;

Проведене ними дослідження привело до основних висновків:

- 1) У випадку, коли довжина хвилі поверхневих збурень виявляється більшою від  $2\pi R_0$ , проявляється нестабільність, збурення поверхні посилюються, як наслідок, нанодріт розпадається на окремі краплини. Тобто:

$$\lambda_{min} > 2\pi R_0$$

- 2) Збурення поверхні нанодроту розвиваються швидше і досягають свого максимального значення при певних значеннях довжин хвиль  $\lambda_{max}$ .
- 3) відстань між краплинами в ланцюжку визначається  $\lambda_{max}$  і ця відстань залежить від ряду факторів, наприклад, орієнтації стержня.

Так, Нікольс і Маллінз у своїх дослідженнях з'ясували наступні довжини хвиль:

$$\lambda_{max} = 8,89R_0 \text{ – для поверхневої дифузії,}$$

$$\lambda_{max} = 9,02R_0 \text{ – для дифузії осадження атомів на поверхню циліндра,}$$

$$\lambda_{max} = 12,96R_0 \text{ – для дифузії атомів з поверхні наноциліндра у вільний простір. [57]}$$

Згідно теорії Ніколса-Маллінза, починається розвиток початкових синусоїдальних збурень нанодроту, що відбуваються за рахунок поверхневої дифузії зв'язаних атомів із зон з більшою кривизною поверхні до зон з меншою кривизною поверхні. Виникаюча спонтанна модифікація форми нанопроводу супроводжується зменшенням її поверхневої (потенціальної) енергії. [50] Принципова схема циліндра, що перебуває у процесі збурень та його остаточний розрив зображено на рисунку 2.

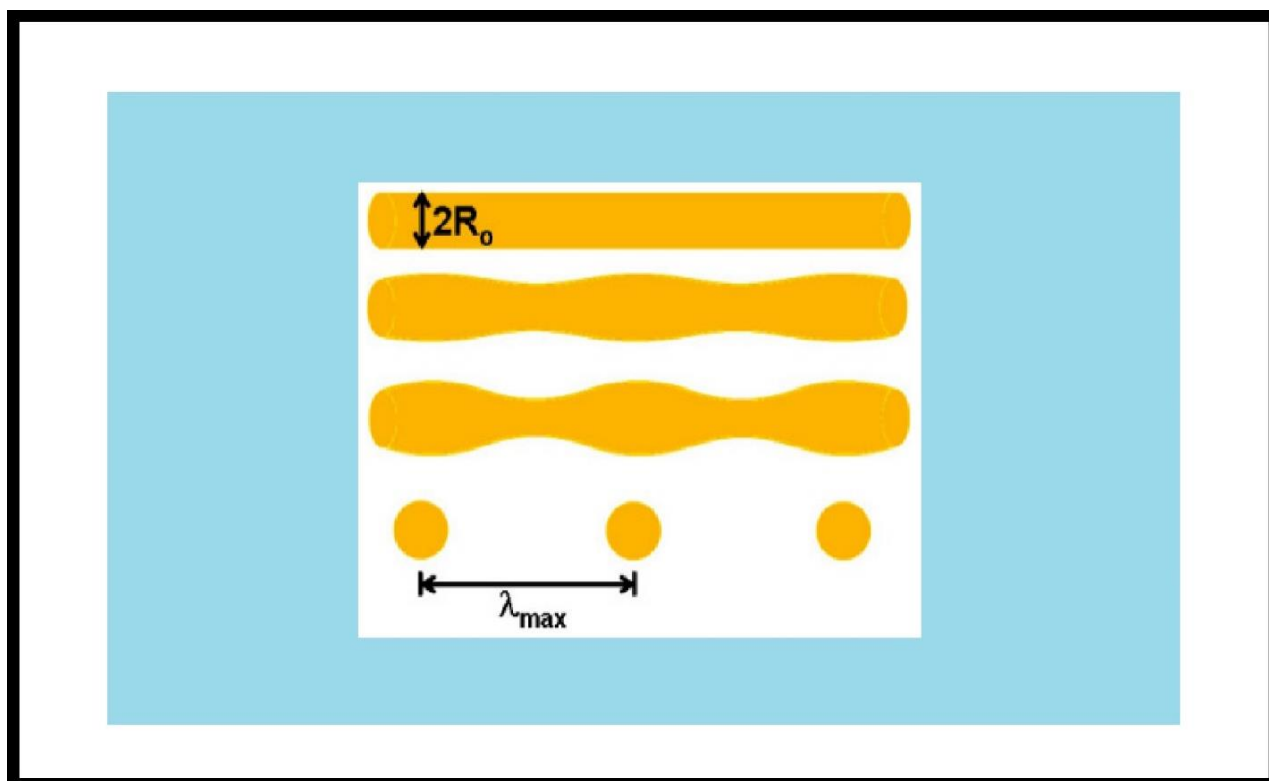


Рисунок 3.1 - принципова ілюстрація збільшення амплітуди збурень дротини, що веде до перетворення її в ланцюг окремих сфероїдальних частинок. Для ідеальної ситуації кінетично домінуюча довжина хвилі  $\lambda_{\max}$  визначає кінцеву відстань між частинками

У даній роботі застосовується кінетичний підхід Монте-Карло для вивчення фізичних процесів розпаду нанодротів з гексагональною щільно упакованою кристалічною структурою на ланцюг з наночастинок. Процес розпаду нанопроволоки базується на відомому механізмі roughening transition (грубого переносу) [49], який зокрема проявляється в квазі-одновимірних системах / нанопроводах з вираженою анізотропією поверхневої енергії. [50] В залежності від кристалічної структури дроту, встановленої температури системи та орієнтації осі відносно кристалічної решітки, довжини хвиль окремих модуляцій нонадроту можуть значно перевищувати, а бути меншими від  $9R_0$ , де  $R_0$  – радіус наноциліндра, що відповідають класичній теорії.

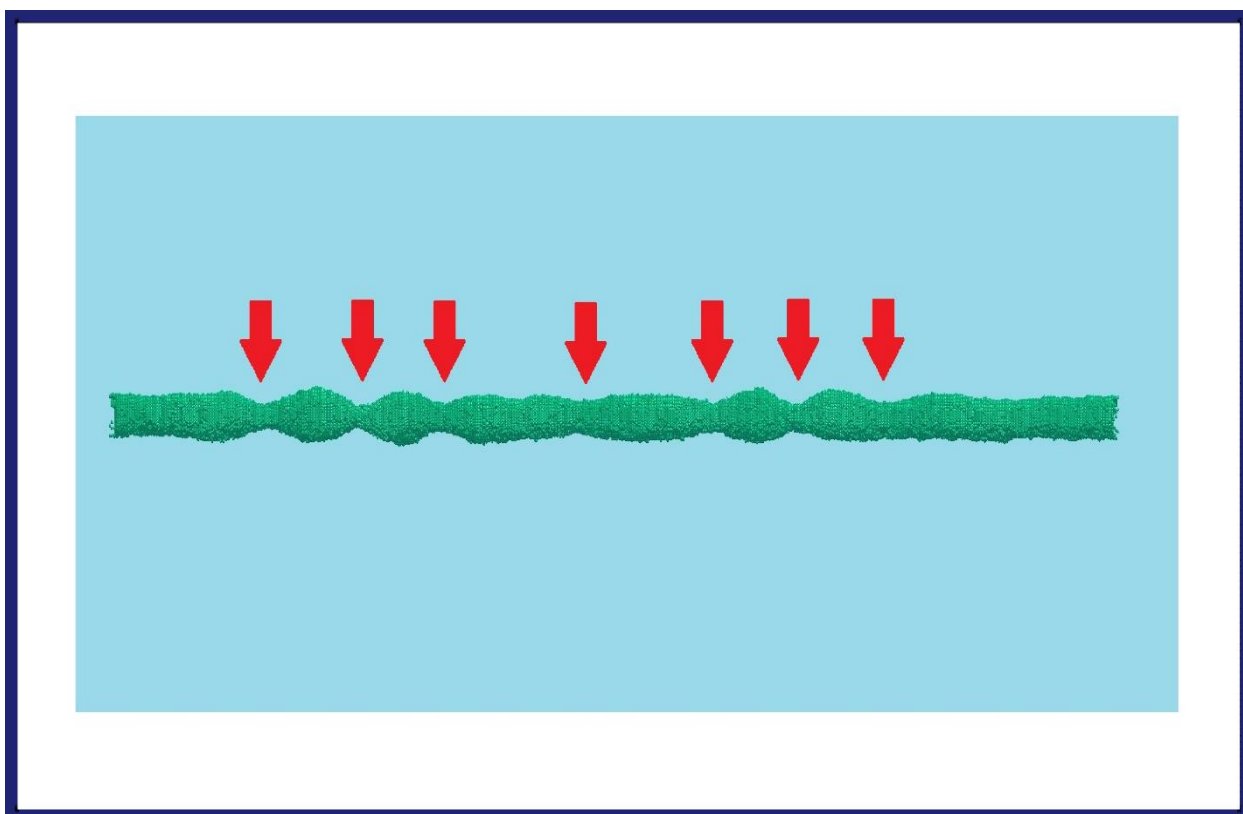


Рисунок 3.2 - зображення комп'ютерної моделі нанопроводу з гексагональною структурою кристалічної решітки, орієнтація осі [001]. Червоні стрілки вказують на місця ймовірного розриву нанодроту.

На певних етапах комп'ютерного моделювання еволюції розпаду, для окремих орієнтацій нанодроту спостерігається чітко виражена хвилеподібна форма. Орієнтуючись на форму наноструктури на цьому етапі можна попередньо передбачити місця, де нанопроволока буде розірвана, рисунок 3. Однак, сценарії розпаду нонапроводу можуть бути різними: так, наприклад, кожна веретеноподібна область нанорозмірної проволочки може перетворитися в окрему краплю, що характерно для довгохвильових поверхневих збурень, або злитися з сусідньою, що притаманно для короткохвильових збурень. Поглинання однієї частинки іншою відбувається за рахунок Оствальдівського дозрівання. [51] При цьому, нерідко краплини зливаються в єдиний «довгоживучий» кластер, що за формою нагадує гантелі, рисунок 4.

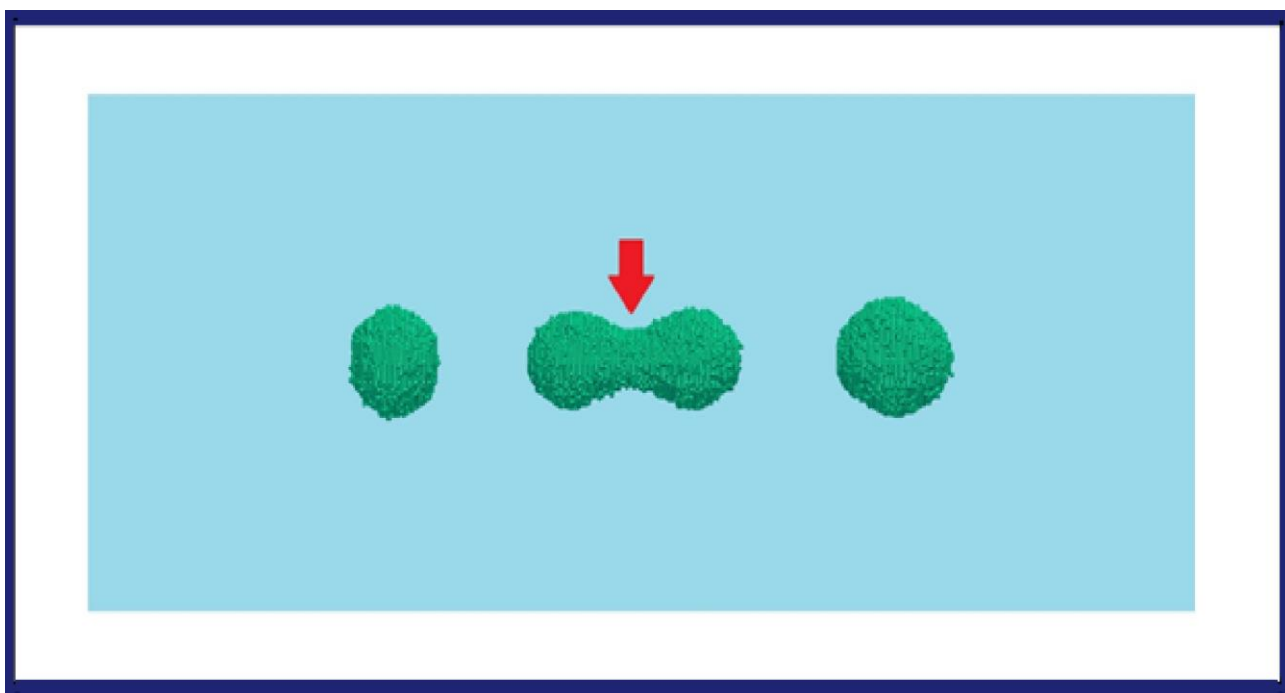


Рисунок 3.3 - зображення комп'ютерної моделі наночастинок з гексагональною структурою кристалічної решітки, орієнтація осі  $[001]$ . Середній кластер утворився шляхом злиття двох сусідніх краплин (Оствальдівське дозрівання).

Виявлені особливості динаміки квазі-одновимірних систем розширюють наші уявлення про фізичні механізми, що беруть участь у розпаді нанопроводів (представлені Ніколсом і Маллінзем як класична модель таких нестабільностей) [52], які можуть бути корисні для створення приладів на основі ланцюгів упорядкованих наночастинок.

### 3.2 Чисельна модель експерименту

Кінетичний метод Монте-Карло, що використовується у даній роботі, застосовується для моделювання форм нанодротів та відслідковування перебігу їх дроблення. Представлений метод використовують також у разі необхідності

моделювання процесів росту наночастинок або інших структур нанорозмірів, в тому числі і для моделювання процесів злиття окремих наночастинок – спікання нанокластерів. Запропонована модель дозволяє прослідкувати процес розвитку нестабільності нанопроводу. Зростання або розчинення наноструктури зазвичай зумовлені розвитком нерівноважних процесів, що викликані дисбалансом речовини.

Так, наприклад, атоми (або молекули) можуть відриватися від поверхні нанодроту і утворювати «газову» оболонку навколо нього, а потім – повертатися назад, осідаючи на поверхні. Атоми, які є частиною наноструктури, локально переходять на інші, вільні місця кристалів, або ж відриваються (щоб знову приєднатися до «газу»). Таким чином, для того, щоб зробити подібні процеси відривання, переміщення та осідання атомів чисельно керованими; для того, щоб відслідковувати поетапно процес дроблення дроту; для того, щоб мати змогу провести аналогію з тенденціями, спостережуваними експериментально – була створена модель, що дозволяє відслідковувати положення кожного атома і керувати процесом розпаду дроту без спотворення результатів досліду.

В тривимірний простір координат поміщається дріт, з попередньо зазначеним напрямком відносно осей координат, що визначається нормальним вектором. Навколо дроту створюється оболонка, де знаходяться відірвані від поверхні наноциліндра атоми. Сукупність усіх атомів навколо нанодротини утворюють «пар». Радіус оболонки вибирається таким чином, аби він в рази перевищував радіус нанодроту. Дана умова необхідно для вільного переміщення атомів в даній області.

Розміри оболонки обираються таким чином, аби відбивання атомів від її стінок не впливало на процес дроблення нанооб'єкта. Для того, щоб уникнути сторонніх ефектів, кінці нанодроту фіксуються. Попередньо обирається розмір фіксованих областей на кінцях, що слугують своєрідними зазорами. Атоми, що знаходяться в зарезервованих областях на кінцях, теж фіксуються і знаходяться в перпендикулярних до осі циліндра площинах. Підхід такого типу є своєрідним аналогом граничних умов.

В модель нанодроту закладена гексагональна щільноупакована кристалічна ґратка, з координаційним числом:  $m_c = 12$ . Координаційне число відповідає максимальній кількості зв'язків окремого атома з сусідніми в кристалічній ґратці.

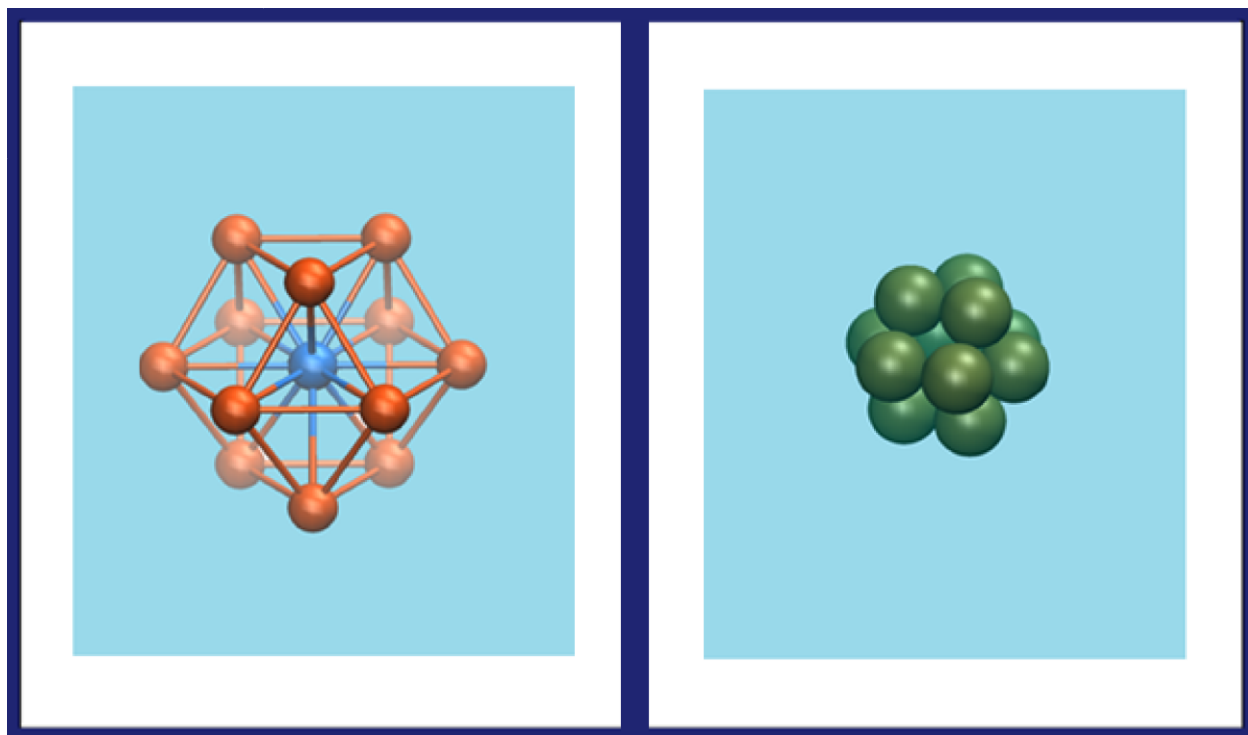


Рисунок 3.4 – ліворуч на рисунку схематично зображено розташування атомів. Картинка наочно відображає 12 зв'язків між центральним синім атомом та рештою дванадцятьма коричневими. Праворуч – картина, що відповідає розташуванню атомів у тому ж порядку, що закладено в комп'ютерну програму.

В моделі за кожен окремий вузол кристалічної ґратки відповідає окрема комірка тривимірного масиву: комірка може бути як заповненою (що означає, що у вузлі ґратки знаходиться атом), так і пустою – вакантне місце. У випадку, якщо атом не повністю оточений, тобто, принаймні в одному із вузлів є вакантне місце, то він може його зайняти. Проте, якщо таких декілька, атом може зайняти будь-яку з них. Саме тому, для кожного напрямку, в якому він може «стрибнути», розраховується ймовірність здійснення «стрибка». Ймовірність переміщень пропорційна температурно-залежним факторам Больцмана:

$$p = e^{-\frac{\Delta}{kT}}$$

Атоми, що знаходяться в «газовій» оболонці навколо нанодроту, можуть змінювати своє положення щоразу на кожному виконуваному циклі програми, тоді як атоми, що входять до структури решітки мають лише «спробу» здійснити переміщення: або «стрибають», або лишаються на місці.

Рухомі атоми решітки мають свої координаційні числа  $m_0 = 1 \dots m_c$  (про що згадувалося вище, для розглядуваної кристалічної структури  $m_c = 12$ ), і вони насправді намагаються здійснювати стрибок з ймовірністю, що пропорційна  $p^{m_0}$ . Тобто, існує пряма залежність від кількості атомів, з якими взаємодіє обраний. Вільні атоми дифундують шляхом стрибків із випадковими кутами розсіювання та фіксованою довжиною стрибка.

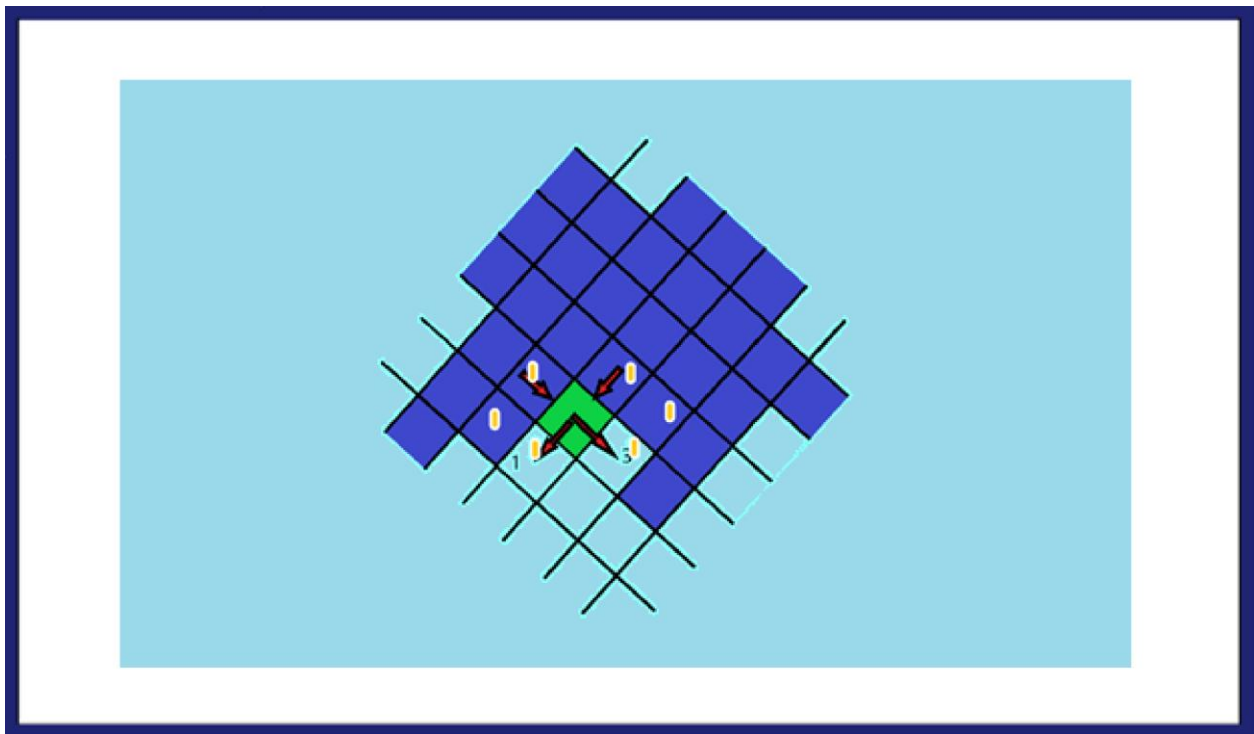


Рисунок 3.6 - на рисунку зображено ілюстрацію поверхневого атома, що може переміщуватися у сусідні вільні вузли кристалічної ґратки. Динаміка атома ілюструється в двовимірному просторі. Де, синім кольором позначені комірки, які є заповненими, а блакитним – вільні. Комірка зеленого кольору відповідає атому, що здійснює стрибок. Числа 1 та 3 – відповідно за кількість зв'язків з



сусідами на новій ймовірній позиції. Жовті позначення вказують на комірки з якими взаємодіє атом в комірці зеленого кольору. Так, максимальне число зв'язків – 6.

Для того, щоб прослідкувати, як випаровування атомів з поверхні впливає на процес дроблення нанопроволоки в моделі розглядається два випадки: у першому випадку атоми безперешкодно можуть покидати поверхневі зони нанодроти та дифундувати у зону «пару», в іншому – випаровування атомів з поверхні блокується. Коли «пар» блокується, число атомів, що відірвалися, значно зменшується. Відстань між сусідніми атомами в гексагональній решітці вважається рівним одиниці. Рухливість поверхневих атомів (коефіцієнт поверхневої дифузії) визначається параметром  $p$ , керованим шкалою активації вільної енергії  $\Delta$ , введеною вище  $p = e^{-\frac{\Delta}{kT}}$ . Енергія парної взаємодії дорівнює  $\varepsilon$  ( $\varepsilon < 0$ ) і представлена у вигляді:

$$\alpha = |\varepsilon|/kT$$

Представлена в роботі кінетична модель Монте-Карло працює за двома безрозмірними термодинамічними параметрами  $p$  та  $\alpha$  з контрольними значеннями «проміжної температури»  $p_0$  та  $\alpha_0$ . Температура  $T$  може бути збільшена або зменшена, змінюючись параметр  $\alpha$ , що обернено пропорційний до неї, за умови, що параметр  $p$  регулюється відповідно до формули:

$$p = (p_0)^{\alpha/\alpha_0}$$

В роботі розглядається два випадки: «холодний» та «теплий» режими з відповідними значеннями  $\alpha = 0,9$  та  $\alpha = 0,8$ .

### 3.3 Розпад дротів з гексагональною кристалічною ґраткою

В роботі розглянуто процес розпаду нанопроводів з гексагональною структурою ґратки з орієнтацією осей [001], [010], [100]. Аби відслідкувати, як зміна параметрів системи впливає на процес дроблення, для кожної з орієнтацій нанодроту проводиться чисельний розрахунок з двома керованими випадками: в першому випадку випаровування атомів з поверхні блокується, в іншому – ні, про що говорилося вище. А також змінюється температура системи аби прослідкувати, як зміни параметрів впливають на швидкість дроблення.

#### 3.3.1 Розпад дроту з орієнтацією [001]

Для чисельного обрахунку розпаду нанодротів вказаної орієнтації в моделі встановлюються наступні значення:  $\alpha = 0.8$ ,  $p = 0.75$  в гарячому режимі,  $\alpha = 0.9$ ,  $p = 0.725$  в холодному режимі – безрозмірні, термодинамічні параметри системи;  $L = 1150$  – довжина дроту,  $d_0 = 30$ , діаметр дроту. В розділі «Чисельна модель», що відстань між атомами прийнята за одиницю.

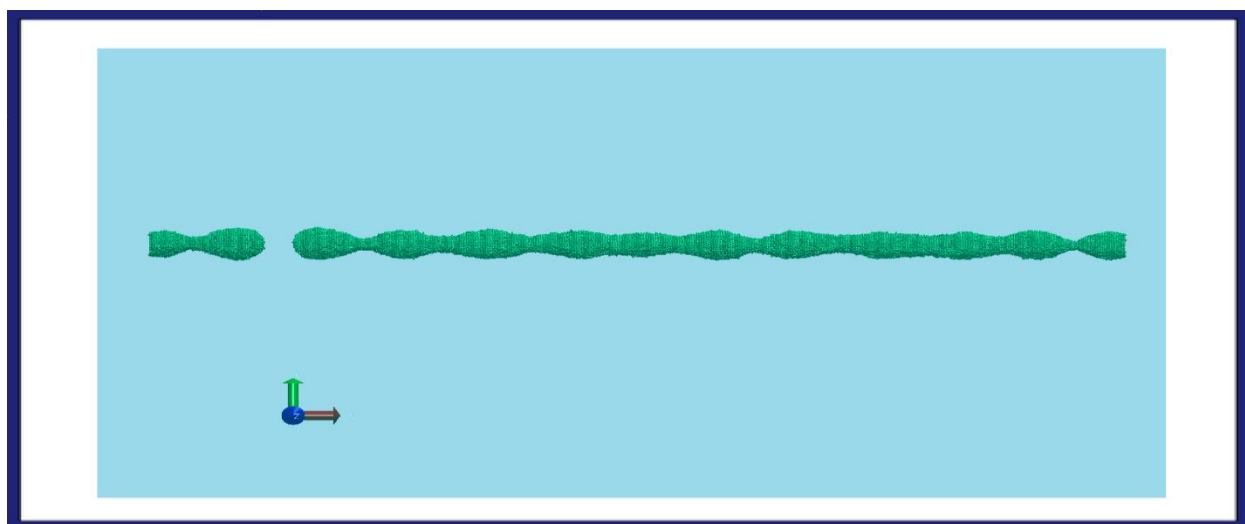


Рисунок 3.3.1.1 - зображення нанопроводу з вираженими збуреннями поверхні, напрямком  $[001]$  з контрольними значеннями  $\alpha = 0,8$  та  $p = 0,75$ . Режим «з паром». Зображення відповідає 40 кроку в циклі програми.

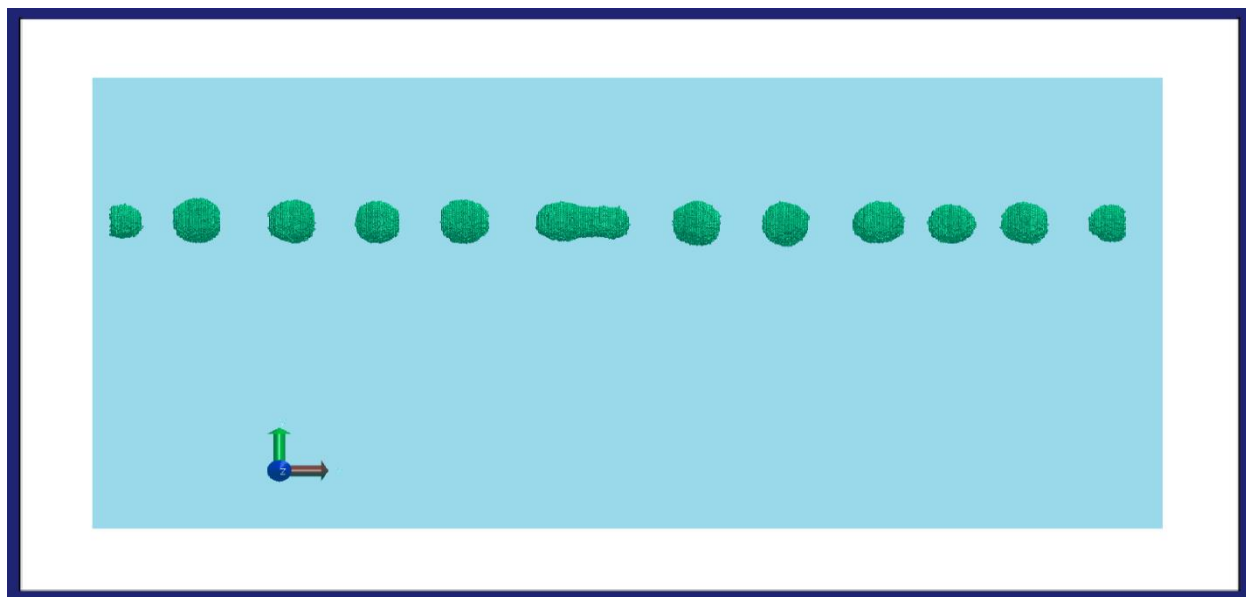


Рисунок 3.3.1.2 - зображення ланцюжка наночастинок, що утворилися в процесі розпаду нанодроту, напрямком осі  $[001]$ , контрольні значення системи  $\alpha = 0,8$  та  $p = 0,75$ . Режим «з паром». Зображення відповідає 80 кроку в циклі програми.

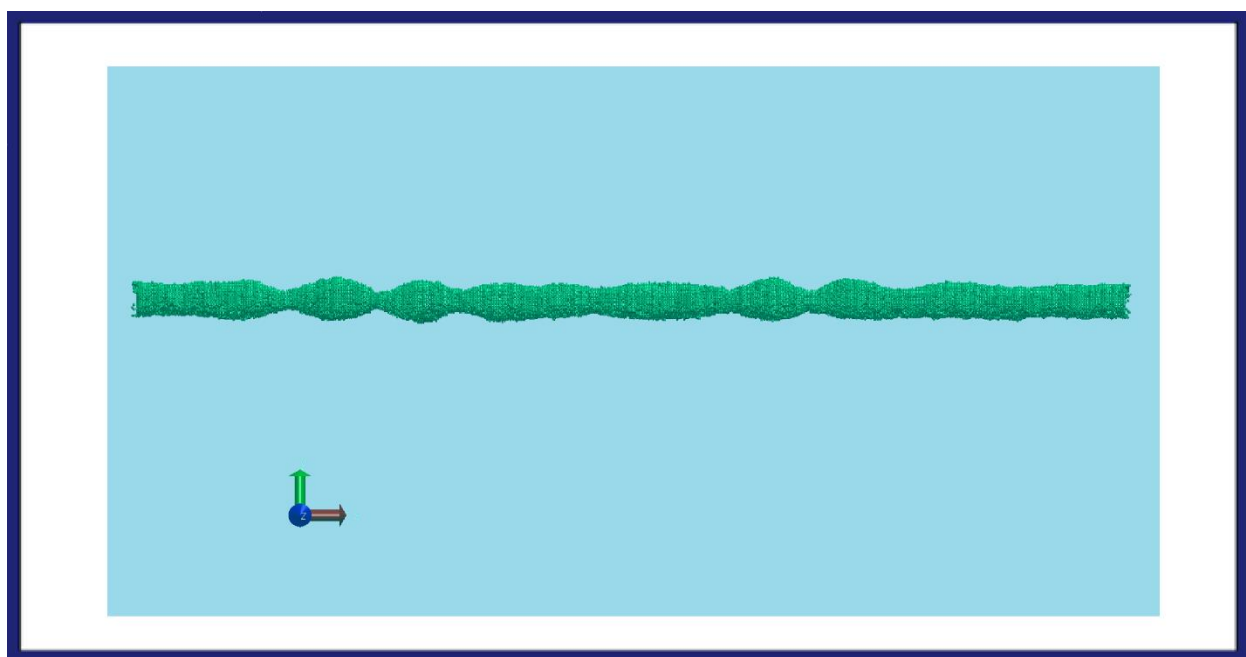


Рисунок 3.3.1.3 - зображення нанопроводу з вираженими збуреннями поверхні, напрямком  $[001]$  з контрольними значеннями  $\alpha = 0,8$  та  $p = 0,75$ . Режим «без пару». Зображення відповідає 60 кроку в циклі програми.

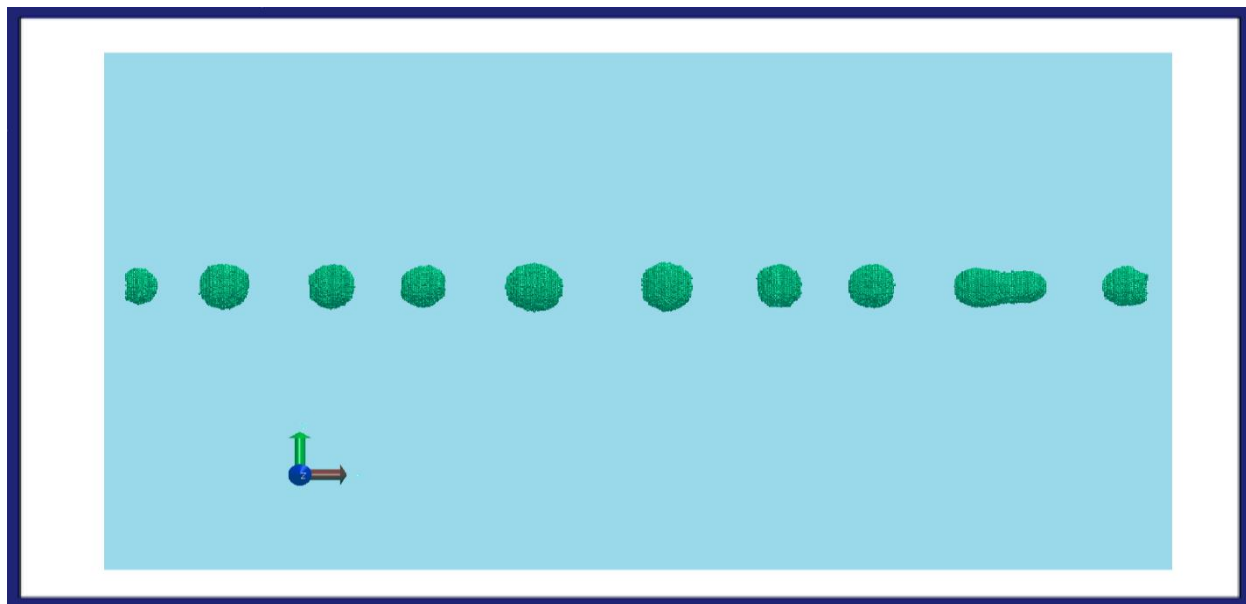


Рисунок 3.3.1.4 - зображення ланцюжка наночастинок, що утворилися в процесі розпаду нанодроту, напрямком осі  $[001]$ , контрольні значення системи  $\alpha = 0,8$  та  $p = 0,75$ . Режим «без пару». Зображення відповідає 140 кроку в циклі програми.

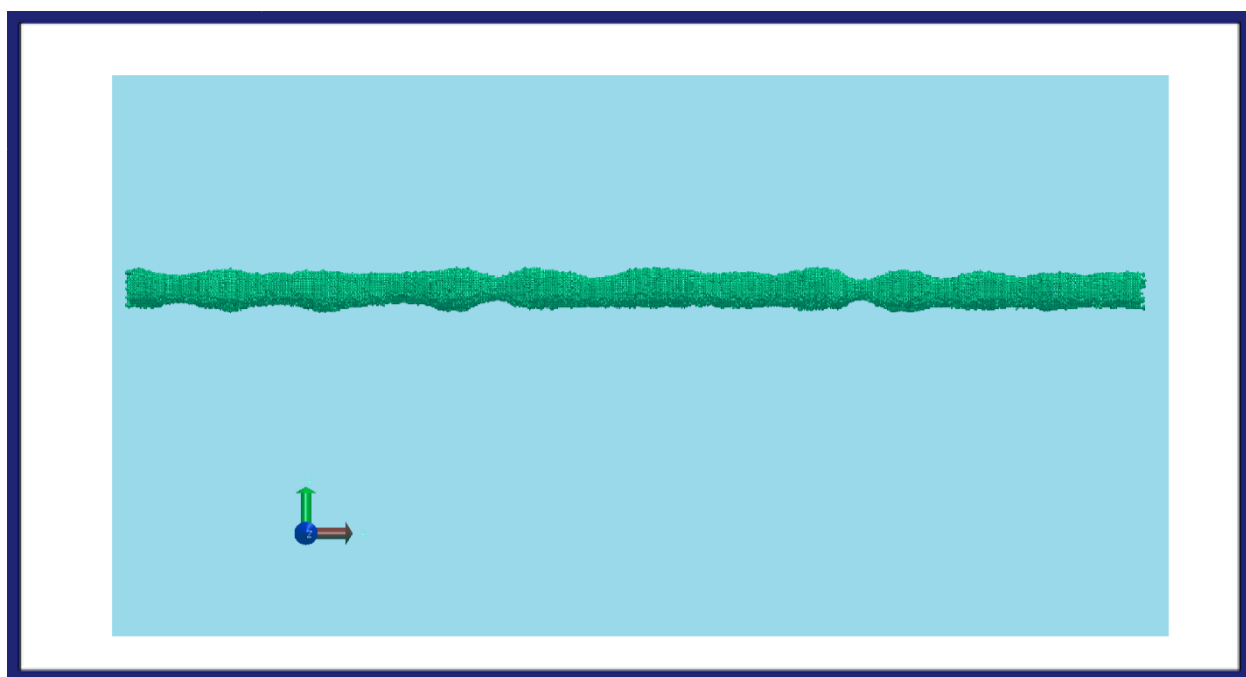


Рисунок 3.3.1.5 – зображення нанопроводу з вираженими збуреннями поверхні, напрямком  $[001]$  з контрольними значеннями  $\alpha = 0,9$  та  $p = 0,75$ . Режим «з паром». Зображення відповідає 60 кроку в циклі програми.

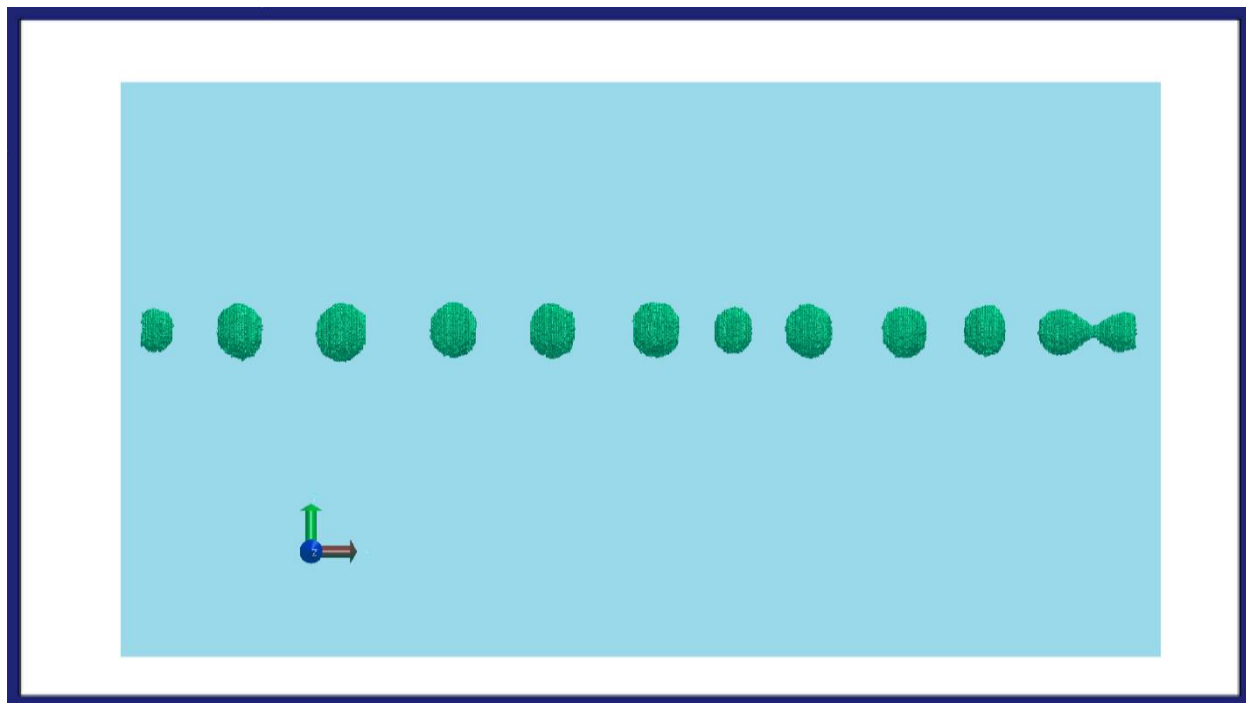


Рисунок 3.3.1.6 – зображення ланцюжка наночастинок, що утворилися в процесі розпаду, напрямком осі  $[001]$ , контрольні значення системи  $\alpha = 0,9$  та  $p = 0,75$ . Режим «з паром». Зображення відповідає 140 кроку в циклі програми.

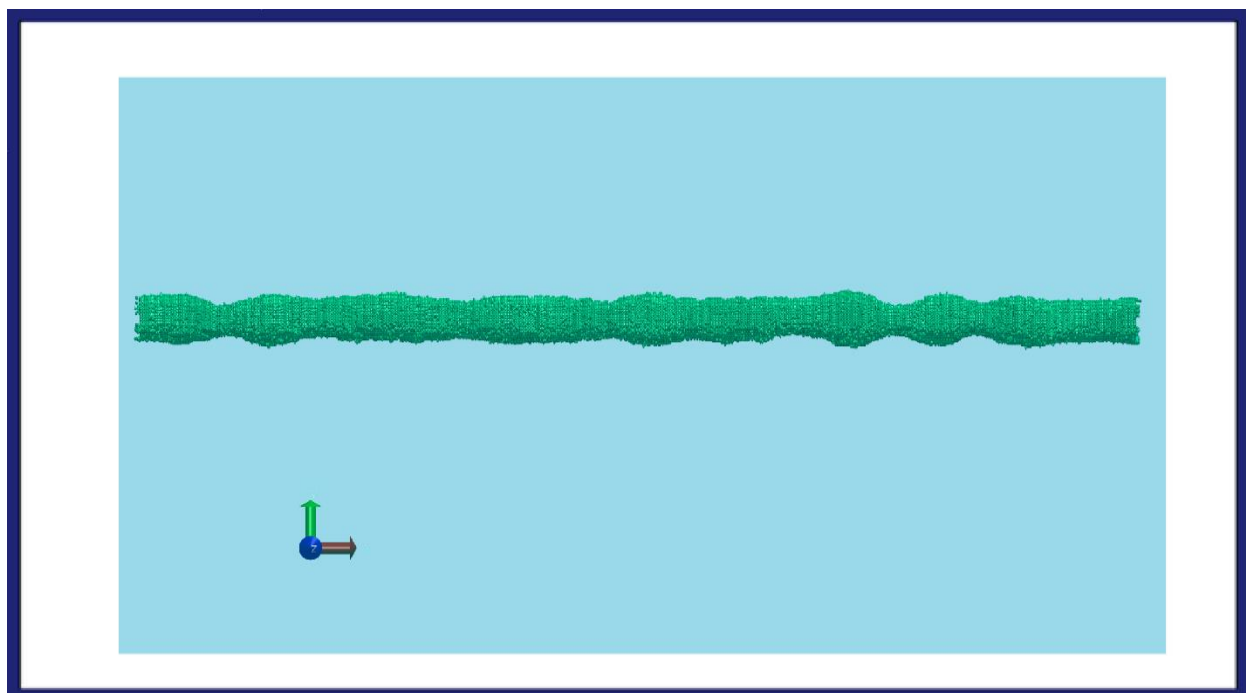


Рисунок 3.3.1.7 – зображення нанопроводу з вираженими збуреннями поверхні, напрямком  $[001]$  з контрольними значеннями  $\alpha = 0,9$  та  $p = 0,75$ . Режим «без пару». Зображення відповідає 120 кроку в циклі програми.

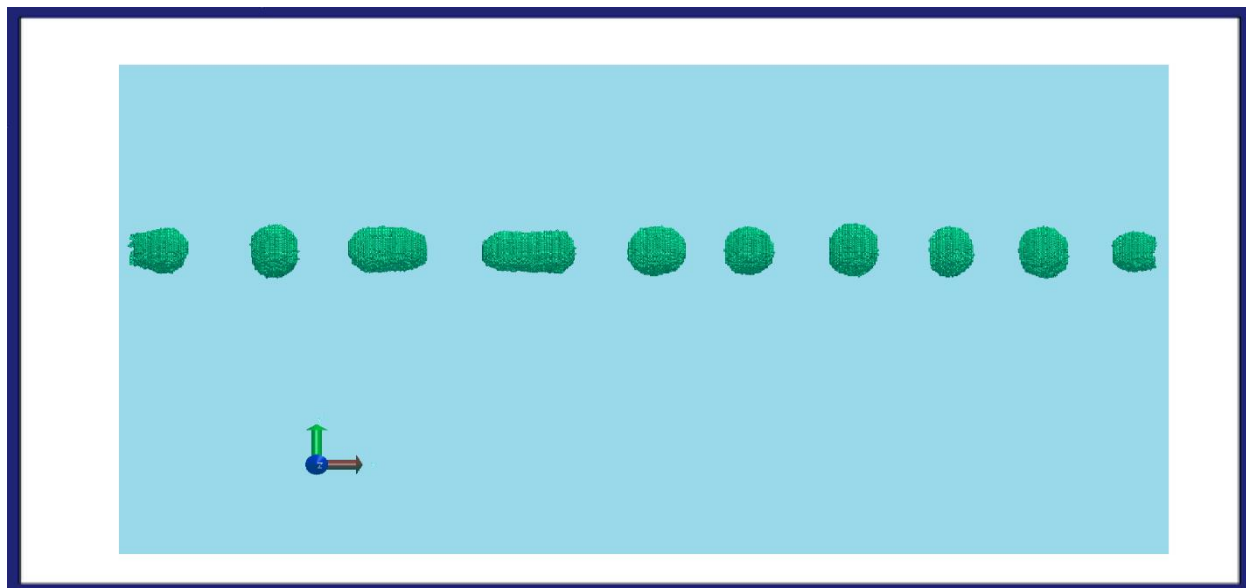


Рисунок 3.3.1.8 – зображення ланцюжка наночастинок, що утворилися в процесі розпаду нанодроту, напрямком осі  $[001]$ , контрольні значення системи  $\alpha = 0,9$  та  $p = 0,75$ . Режим «без пару». Зображення відповідає 195 кроку в циклі програми.

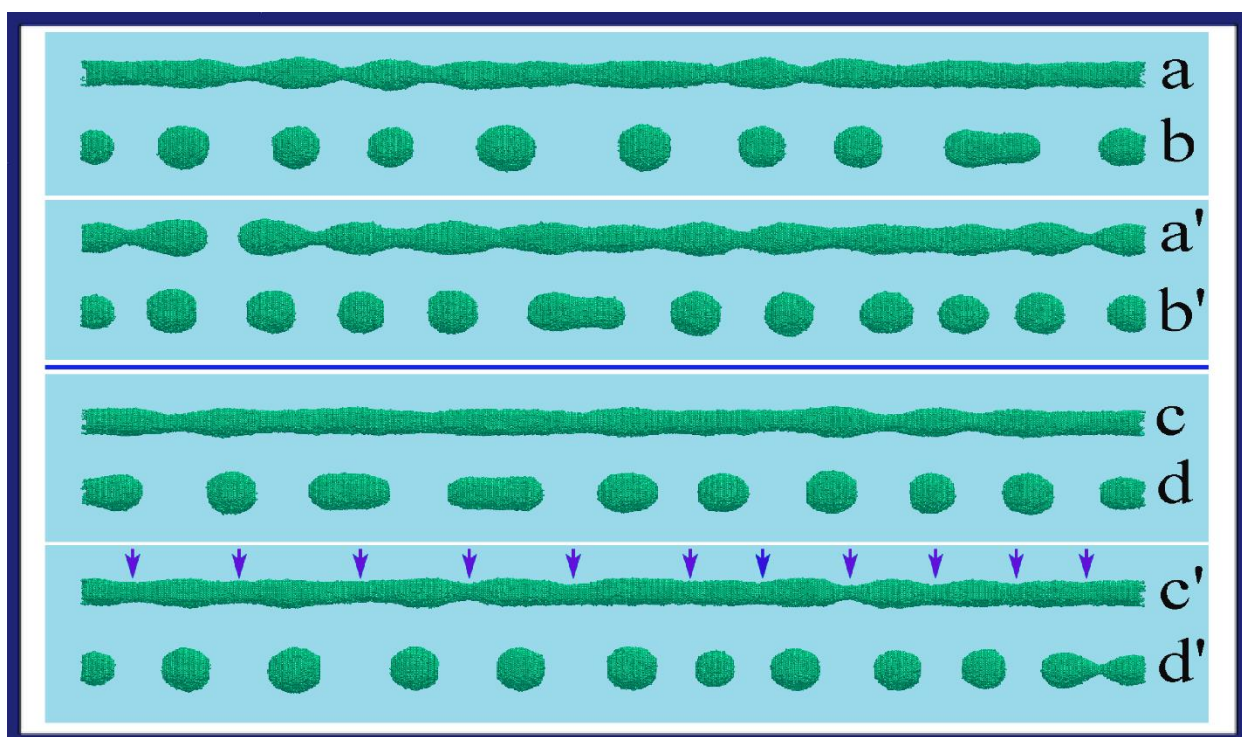


Рисунок 3.3.1.9 – зображення нанопроводу та наночастинок, що утворилися в процесі розпаду, для кожного розглянутого випадку. Напрямок осі [001]. Літерами зі штрихом позначено режим «з паром», літерами без штрихів – «без пару». Картинка створена для порівняння результатів двох режимів з однаковими контрольними значеннями. **(a,b)** Динаміка нанодроту [001] в гарячому режимі з блокованим випаровуванням:  $\alpha = 0.8, p = 0.75, L = 1150$  (довжина дроту),  $d_0 = 30$  (діаметр дроту)  $\lambda/R_0 \approx 8.5$ . Нанодроти **(a)**, **(b)** відтворені після  $t = 1.2$  та  $2.8 (\times 10^6)$  кроків моделі МК відповідно. **(a` ,b`)** Розпад нанодроту [001] в гарячому режимі з випаровуванням:  $\alpha = 0.8, p = 0.75, L = 1150, d_0 = 30, \lambda/R_0 \approx 7$ . **(a`)**, **(b`)** Нанодроти відтворені після  $t = 0.8$  та  $1.6 (\times 10^6)$  кроків моделі МК відповідно. **(c, d)** Динаміка нанодроту [001] в холодному режимі з блокованим випаровуванням:  $\alpha = 0.9, p = 0.725, L = 1150, d_0 = 30$  та  $\lambda/R_0 \approx 8.5$ . **(c)**, **(d)** Конфігурація нанодроту відтворена після  $t = 2.4$  та  $3.9 (\times 10^6)$  кроків моделі МК відповідно. **(c` , d`)** Розпад нанодроту [001] в холодному режимі з випаровуванням:  $\alpha = 0.9, p = 0.725, L = 1150, d_0 = 30$  та  $\lambda/R_0 \approx 7$ . **(c`)**, **(d`)** Конфігурація нанодроту відтворена після  $t = 1.2$  та  $2.8 (\times 10^6)$  кроків моделі МК відповідно.

Отже, для даного випадку, для орієнтації проводу [001] спостерігається наступна картина: при вставленні термодинамічного параметру  $\alpha = 0.8$  нанодріт довжиною  $L = 1150$ , радіусом  $R_0 = 15$  розпадається на 8 окремих краплин у випадку, коли випаровування атомів з поверхні було блоковано. Довжина збурень, що розвилася в процесі розпаду, порядку:  $\lambda = 8.5R_0$ . У випадку, коли пар не блокувався кількість частинок зросла до 10, а довжина хвилі поверхневих збурень зменшилася до  $\lambda = 7R_0$ .

Подібна ситуація спостерігається і при  $\alpha = 0.9$ . В режимі «без пара» утворилося 8 краплин, коли «пар» увімкнули – число зросло до 9. А довжина збурень зменшилася з  $\lambda = 8.5R_0$  до  $\lambda = 7R_0$ . Звісно, що значення «пара» значніше проявляється з підвищенням температури, коли концентрація вільних атомів навколо проводу зростає. Слід відмітити, при збільшенні

термодинамічного параметру  $\alpha$  з 0,8 до 0,9 збільшився і час розпаду проводу. До кожного з малюнків зроблено підпис, де можна побачити на якому кроці циклу утворився ланцюжок з окремих краплин. Так, наприклад, для режиму «без пару» з параметрами  $\alpha = 0,9$  та  $p = 0,75$  – це 195 крок. Слід відмітити, що окрема ітерація циклу займає 10 хвилин.

### 3.3.2 Розпад дроту з орієнтацією [010]

Для чисельного обрахунку розпаду нанодротів вказаної орієнтації в моделі встановлюються наступні значення:  $\alpha = 0.8$ ,  $p = 0.75$  в гарячому режимі,  $\alpha = 0.9$ ,  $p = 0.725$  в холодному режимі – безрозмірні, термодинамічні параметри системи;  $L = 1150$  – довжина дроту,  $d_0 = 30$ , діаметр дроту.

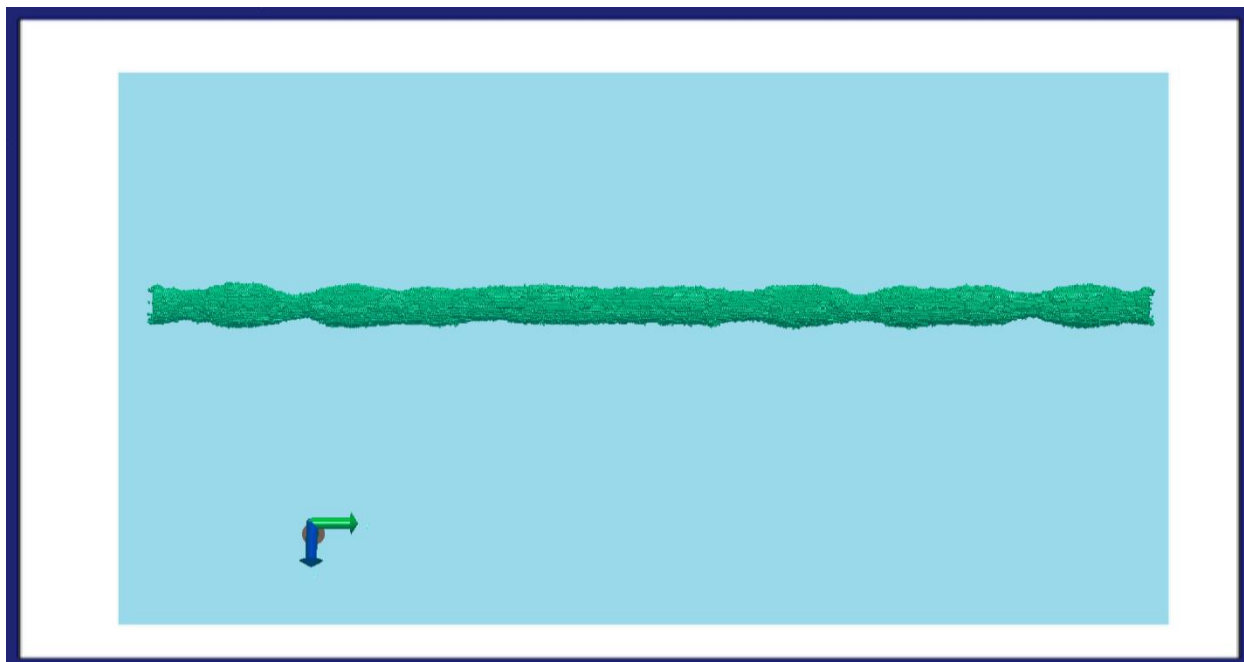




Рисунок 3.3.2.1 – зображення нанопроводу з вираженими збуреннями поверхні, напрямком  $[010]$  з контрольними значеннями  $\alpha = 0,8$  та  $p = 0,75$ . Режим «без пару». Зображення відповідає 80 кроку в циклі програми.

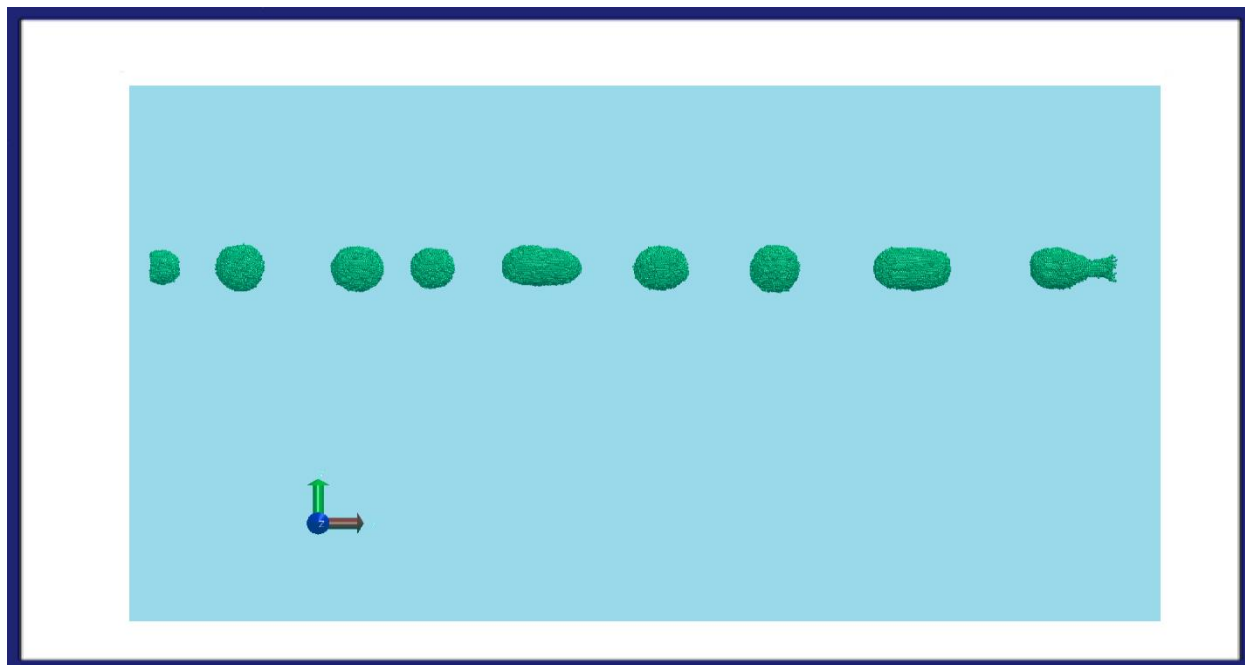


Рисунок 3.3.2.2 – зображення ланцюжка наночастинок, що утворилися в процесі розпаду нанодроту, напрямком осі  $[010]$ , контрольні значення системи  $\alpha = 0,8$  та  $p = 0,75$ . Режим «без пару». Зображення відповідає 154 кроку в циклі програми.

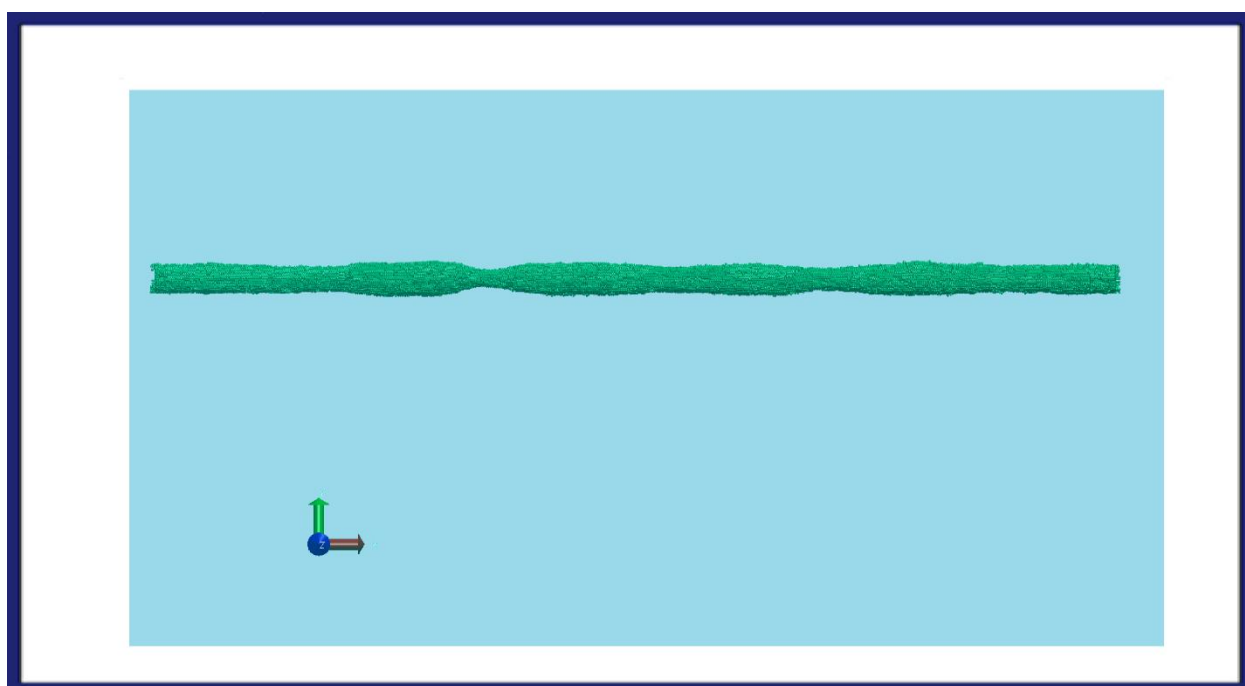


Рисунок 3.3.2.3 – зображення нанопроводу з вираженими збуреннями поверхні, напрямком  $[010]$  з контрольними значеннями  $\alpha = 0,8$  та  $p = 0,75$ . Режим «з паром». Зображення відповідає 360 кроку в циклі програми.

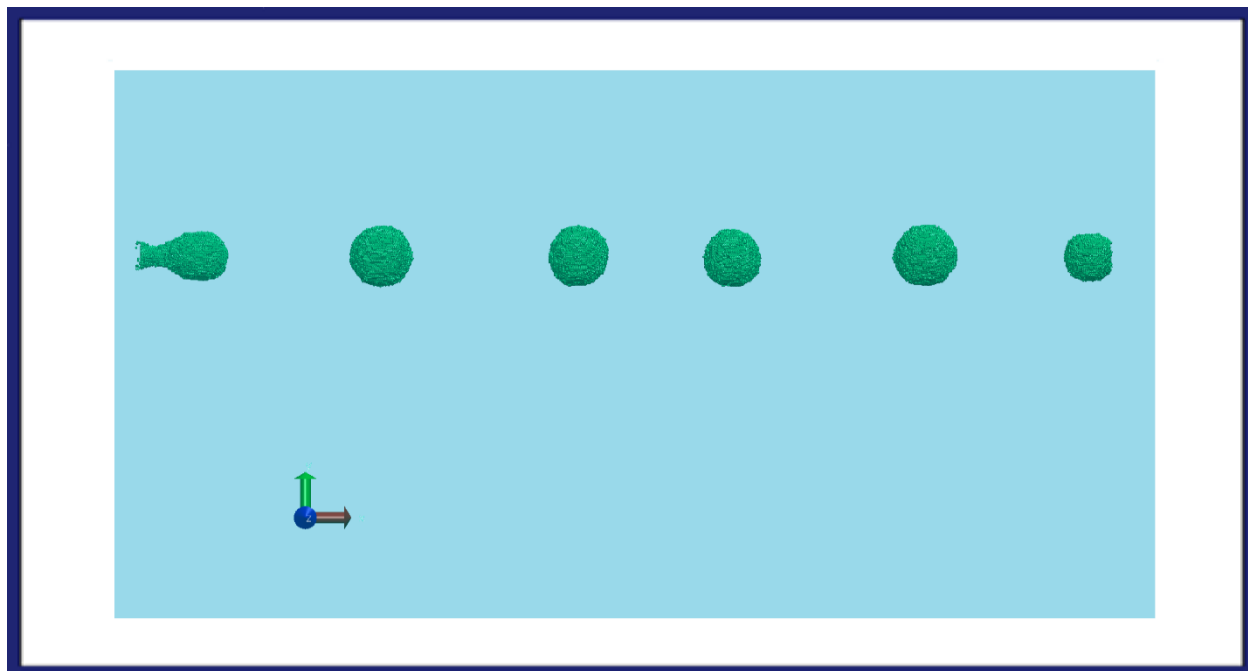


Рисунок 3.3.2.4 – зображення ланцюжка наночастинок, що утворилися в процесі розпаду, напрямком осі  $[010]$ , контрольні значення системи  $\alpha = 0,8$  та  $p = 0,75$ . Режим «з паром». Зображення відповідає 560 кроку в циклі програми.

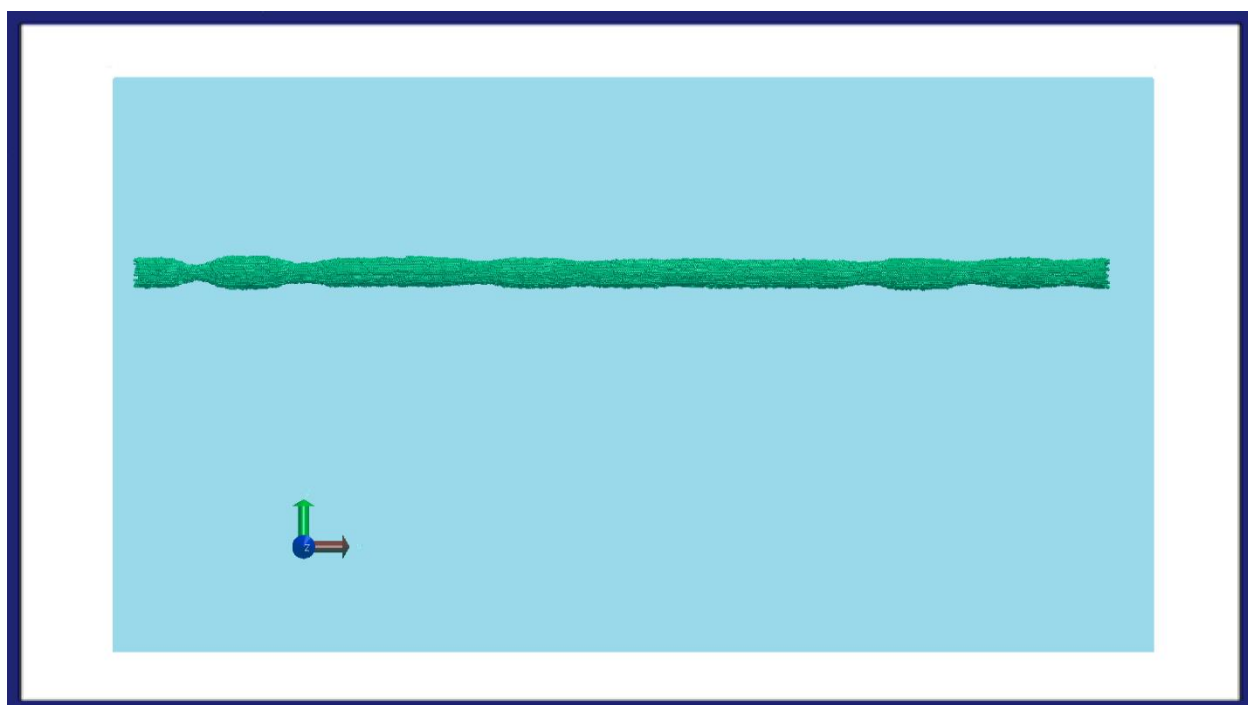


Рисунок 3.3.2.5 – зображення нанопроводу з вираженими збуреннями поверхні, напрямком  $[010]$  з контрольними значеннями  $\alpha = 0,9$  та  $p = 0,725$ . Режим «без пару». Зображення відповідає 140 кроку в циклі програми.

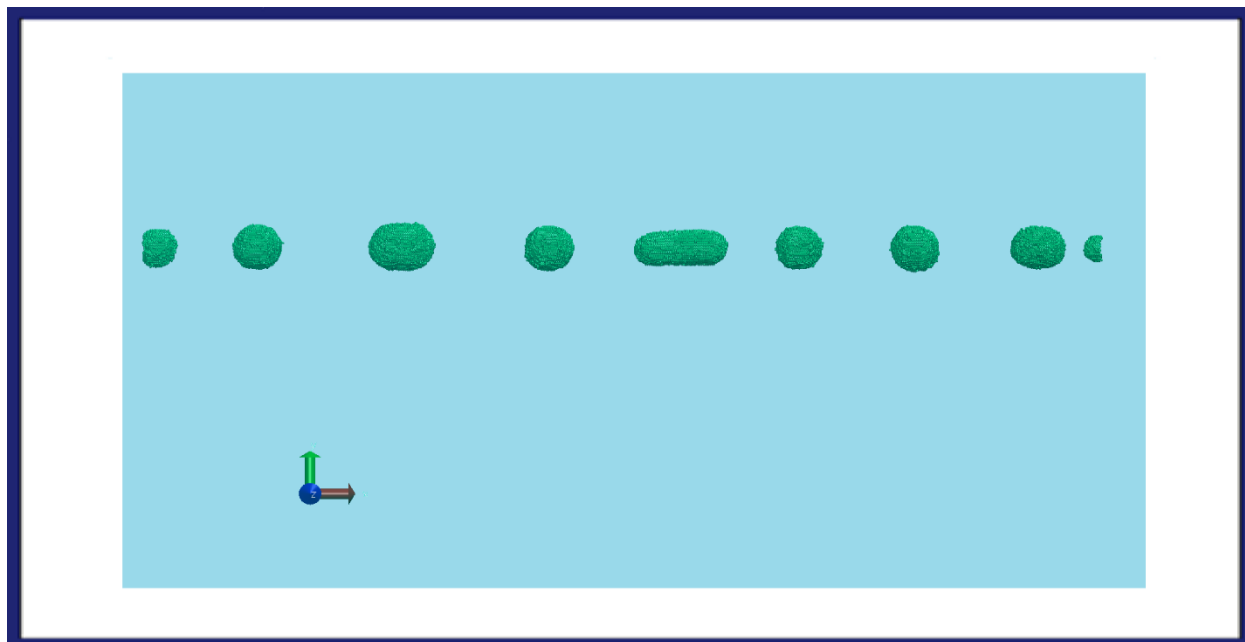


Рисунок 3.3.2.6 – зображення ланцюжка наночастинок, що утворилися в процесі розпаду, напрямком осі  $[010]$ , контрольні значення системи  $\alpha = 0,9$  та  $p = 0,725$ . Режим «без пару». Зображення відповідає 333 кроку в циклі програми.

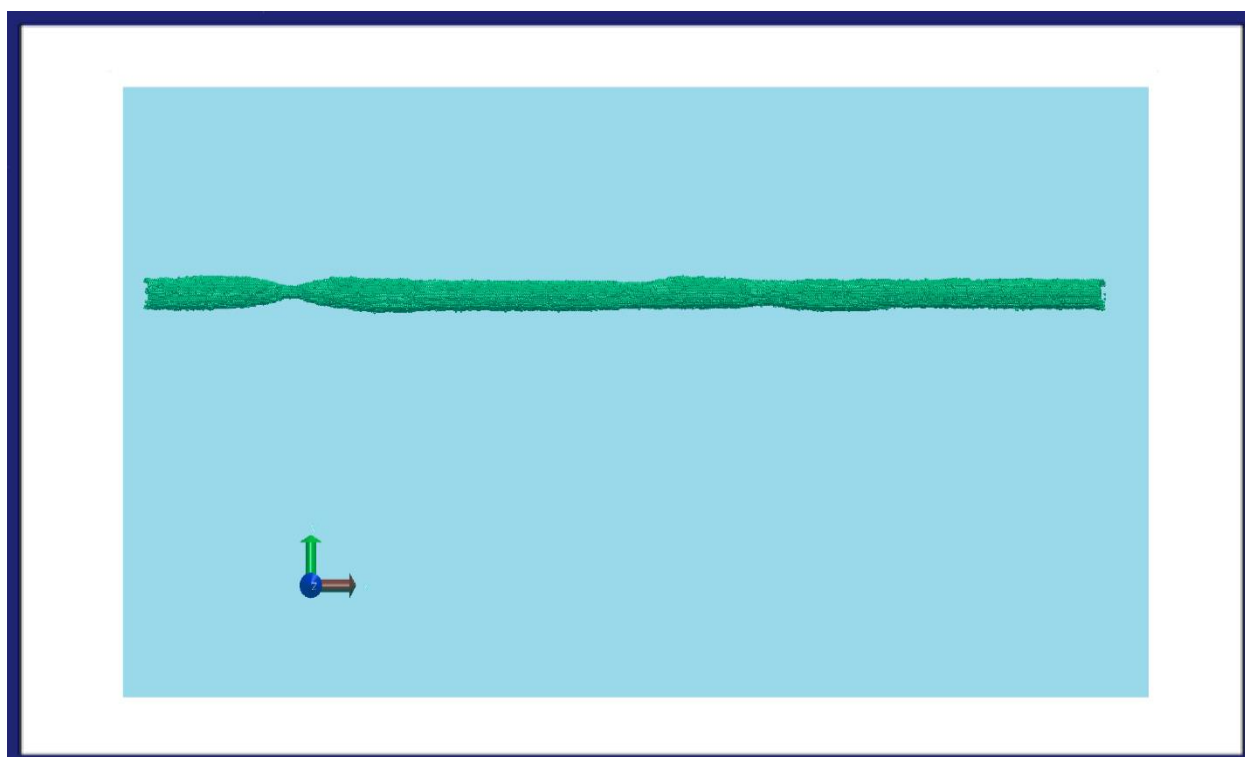


Рисунок 3.3.2.7 – зображення нанопроводу з вираженими збуреннями поверхні, напрямком  $[010]$  з контрольними значеннями  $\alpha = 0,9$  та  $p = 0,725$ . Режим «з паром». Зображення відповідає 500 кроку в циклі програми.

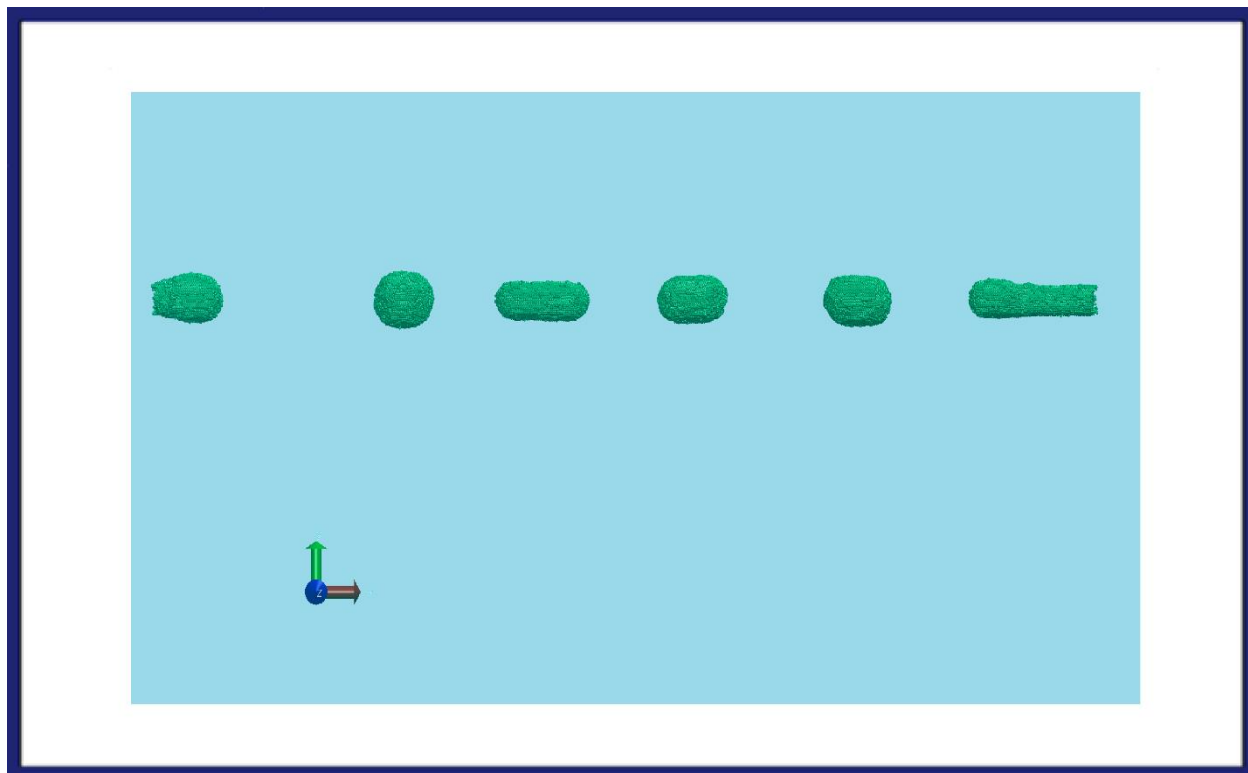


Рисунок 3.3.2.8 – зображення ланцюжка наночастинок, що утворилися в процесі розпаду, напрямком осі  $[010]$ , контрольні значення системи  $\alpha = 0,9$  та  $p = 0,725$ . Режим «з паром». Зображення відповідає 750 кроку в циклі програми.

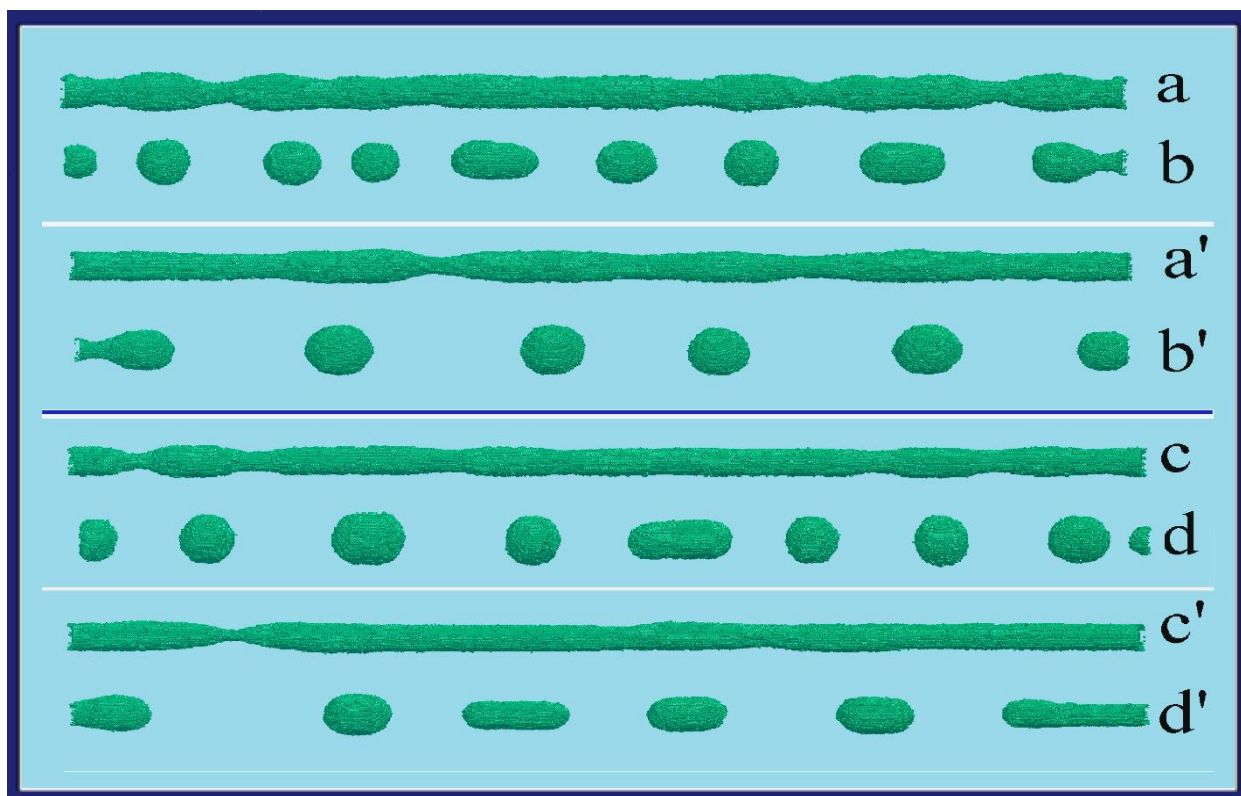


Рисунок 3.3.2.9 – зображення нанопроводу та наночастинок, що утворилися в процесі розпаду, для кожного розглянутого випадку. Напрямок осі [010]. Літерами зі штрихом позначено режим «з паром», літерами без штрихів – «без пару». Картинка створена для порівняння результатів двох режимів з однаковими контрольними значеннями. **(a,b)** Динаміка нанодроту [010] в гарячому режимі з блокованим випаровуванням:  $\alpha = 0.8, p = 0.75, L = 1150$  (довжина дроту),  $d_0 = 30$  (діаметр дроту)  $\lambda/R_0 \approx 9.6$ . Нанодроти (a), (b) відтворені після  $t = 1.6$  та  $3.08 (\times 10^6)$  кроків моделі МК відповідно. **(a',b')** Розпад нанодроту [010] в гарячому режимі з випаровуванням:  $\alpha = 0.8, p = 0.75, L = 1150, d_0 = 30, \lambda/R_0 \approx 15.3$ . **(a'), (b')** Нанодроти відтворені після  $t = 7.2$  та  $11.2 (\times 10^6)$  кроків моделі МК відповідно. **(c, d)** Динаміка нанодроту [010] в холодному режимі з блокованим випаровуванням:  $\alpha = 0.9, p = 0.725, L = 1150, d_0 = 30$  та  $\lambda/R_0 \approx 9.6$ . **(c), (d)** Конфігурація нанодроту відтворена після  $t = 2.8$  та  $6.66 (\times 10^6)$  кроків моделі МК відповідно. **(c', d')** Розпад нанодроту [010] в холодному режимі з випаровуванням:  $\alpha = 0.9, p = 0.725, L = 1150, d_0 =$

30 та  $\lambda/R_0 \approx 15,3$ . (с`), (d`) Конфігурація нанодроту відтворена після  $t = 10$  та  $15 (\times 10^6)$  кроків моделі МК відповідно.

Зі зміною напрямку осі з  $[001]$  на  $[010]$  спостерігаються відмінності. Так для  $\alpha = 0,8$  та  $p = 0,75$  в режимі «без пара» кількість утворених крапель – 7, а в режимі з «паром» кількість зменшилася до 4, тоді як для напрямку  $[001]$  їхня кількість навпаки збільшувалася. Довжина поверхневих збурень порядку звичного значення  $\lambda = 9R_0$ . «Пар» значно збільшує хвильові збурення нанодроту,  $\lambda = 15,3$ . Якщо порівнювати розрахунки з аналогічними параметрами для орієнтації  $[001]$  слід підкреслити, що «пар» коротку довжину хвильових збурень робить ще коротшою, а довгу – помітно розтягує. Окремо слід сказати про те, що моделювання розпаду нанопроволоки орієнтацією  $[001]$  займає значно більше машинного часу, оскільки порівнюючи, до прикладу, режим «з паром» для  $\alpha = 0,9$  бачимо, що провід орієнтації  $[100]$  повністю переходить в чітко сформовані краплини на 195 кроці за часом, тоді як для  $[010]$  процес дроблення зайняв 750 кроків.

### 3.3.3 Розпад дроту з орієнтацією $[100]$

Для чисельного обрахунку розпаду нанодротів вказаної орієнтації в моделі встановлюються наступні значення:  $\alpha = 0,8$ ,  $p = 0,75$  в гарячому режимі,  $\alpha = 0,9$ ,  $p = 0,725$  в холодному режимі – безрозмірні, термодинамічні параметри системи;  $L = 1150$  – довжина дроту,  $d_0 = 30$ , діаметр дроту.

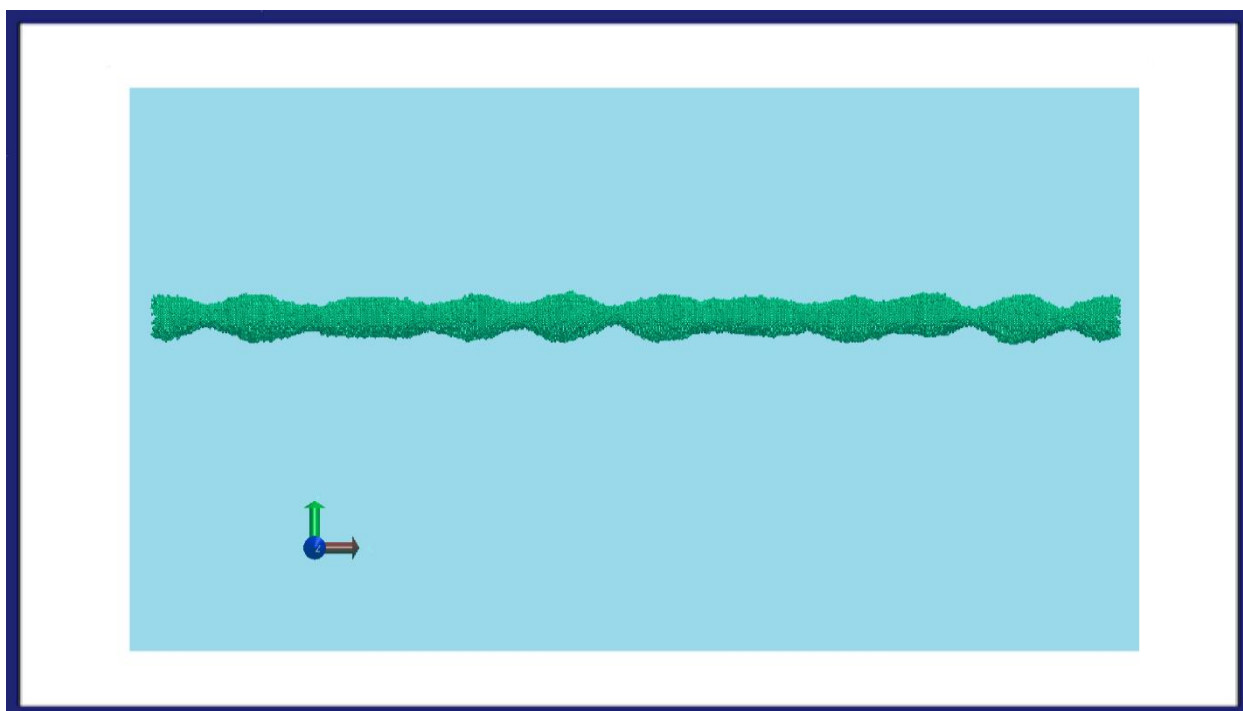


Рисунок 3.3.3.1 – зображення нанопроводу з вираженими збуреннями поверхні, напрямком  $[100]$  з контрольними значеннями  $\alpha = 0,8$  та  $p = 0,75$ . Режим «без пару». Зображення відповідає 100 кроку в циклі програми.

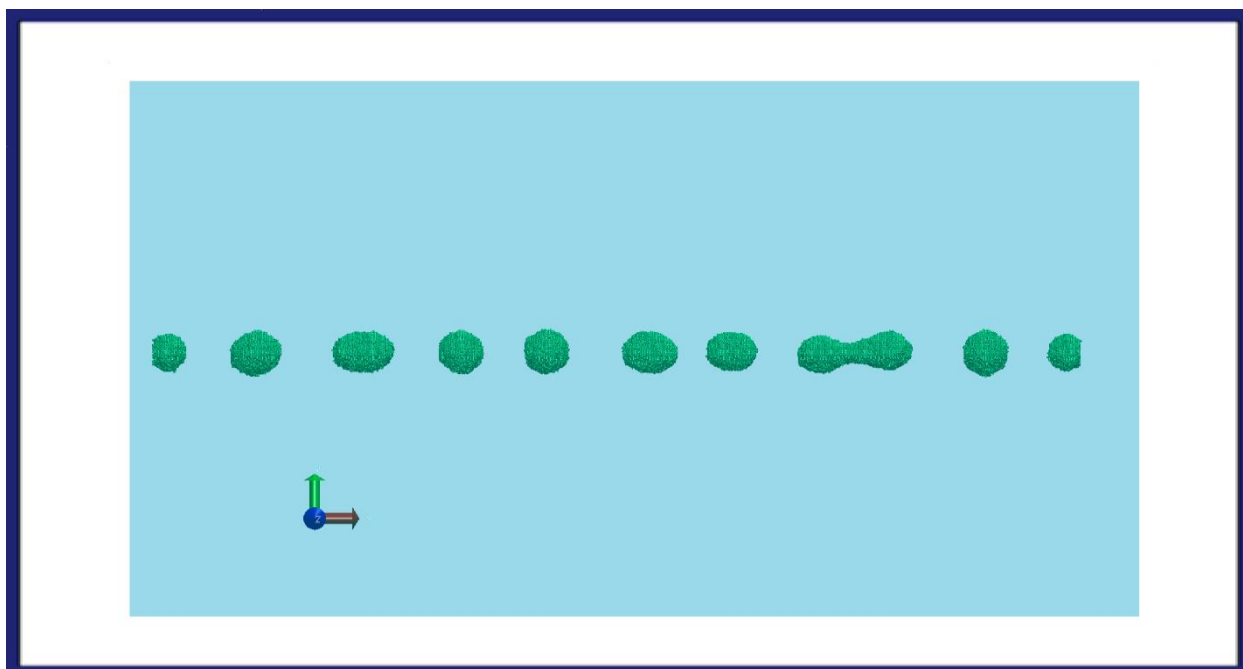


Рисунок 3.3.3.2 – зображення ланцюжка наночастинок, що утворилися в процесі розпаду нанодруту, напрямком осі  $[100]$ , контрольні значення системи  $\alpha =$

0,8 та  $p = 0,75$ . Режим «без пару». Зображення відповідає 140 кроку в циклі програми.

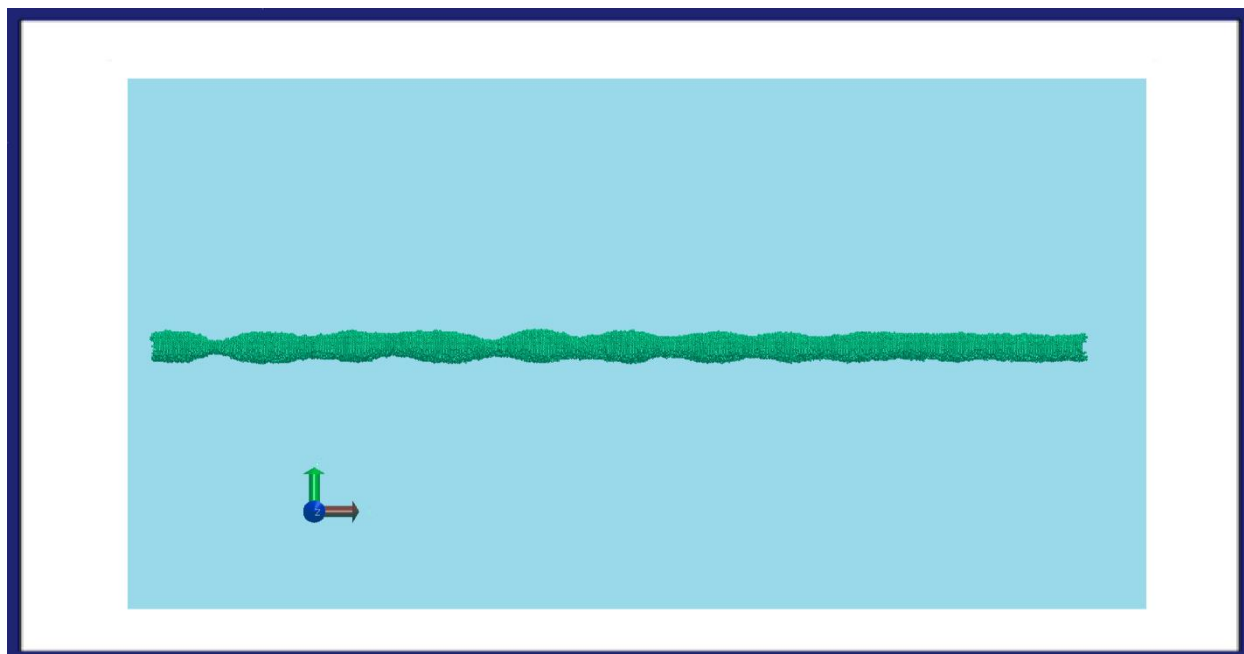


Рисунок 3.3.3.3 – зображення нанопроводу з вираженими збуреннями поверхні, напрямком  $[100]$  з контрольними значеннями  $\alpha = 0,8$  та  $p = 0,75$ . Режим «з паром». Зображення відповідає 60 кроку в циклі програми.

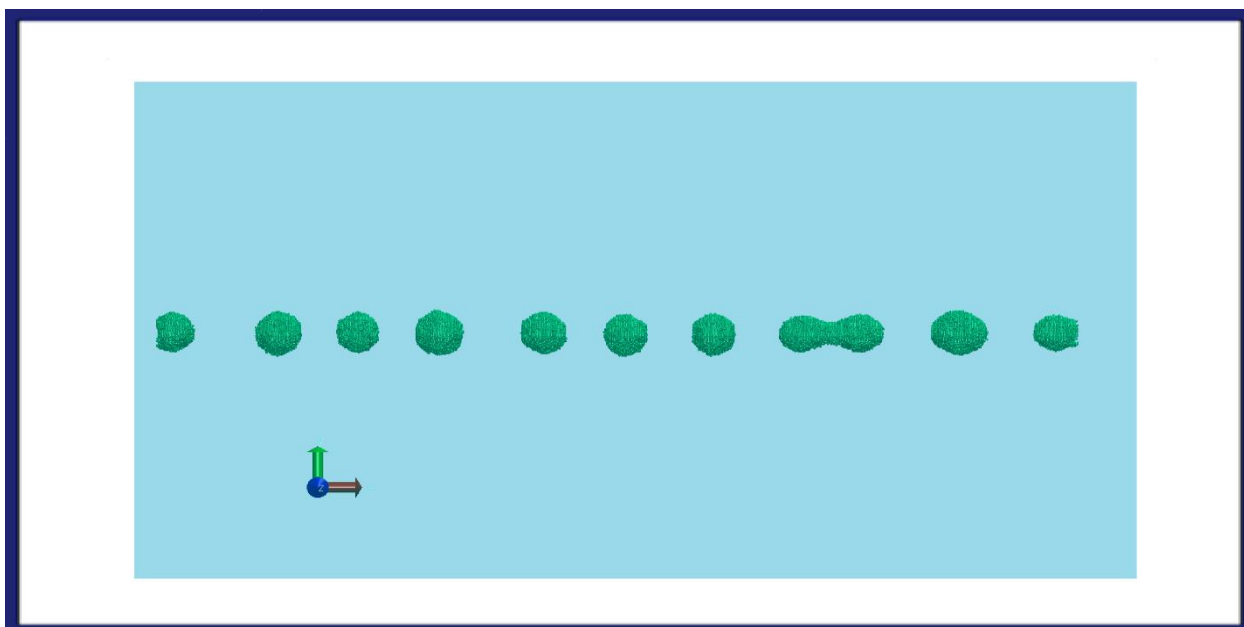


Рисунок 3.3.3.4 – зображення ланцюжка наночастинок, що утворилися в процесі розпаду, напрямком осі  $[100]$ , контрольні значення системи  $\alpha = 0,8$  та  $p = 0,75$ . Режим «з паром». Зображення відповідає 160 кроку в циклі програми.



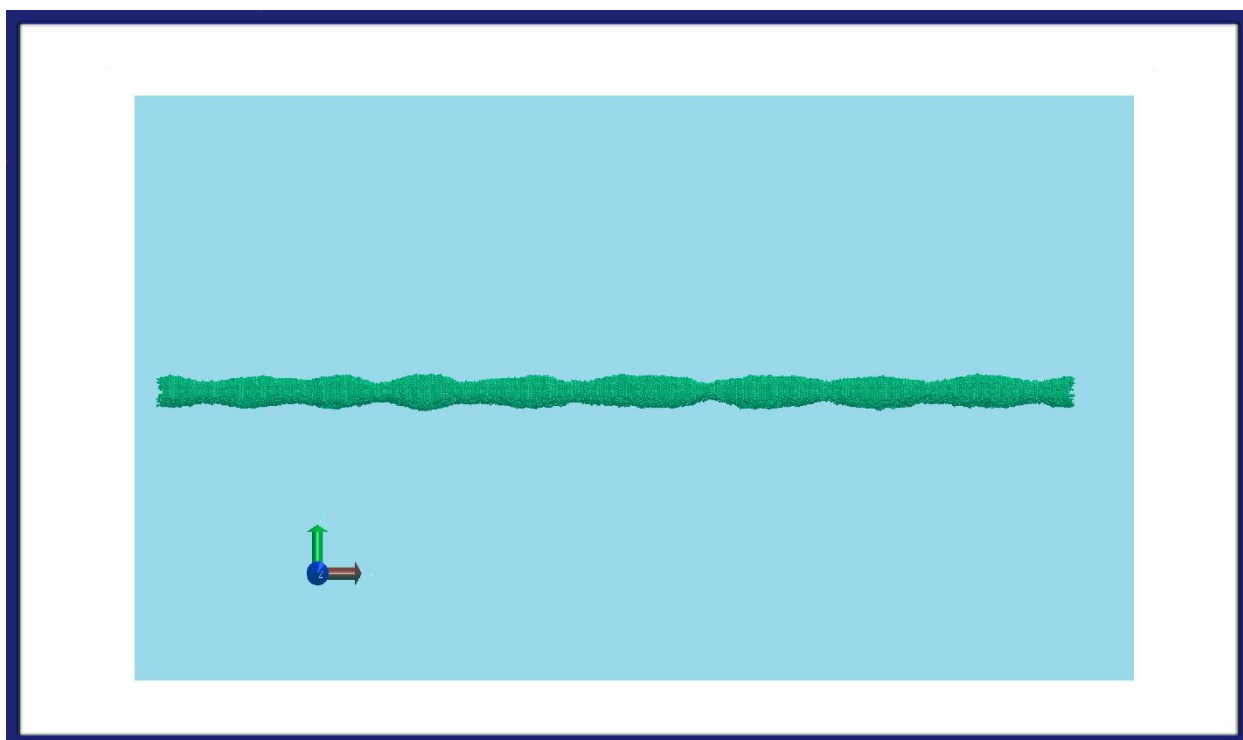


Рисунок 3.3.3.5 – зображення нанопроводу з вираженими збуреннями поверхні, напрямком  $[100]$  з контрольними значеннями  $\alpha = 0,9$  та  $p = 0,725$ . Режим «без пару». Зображення відповідає 120 кроку в циклі програми.

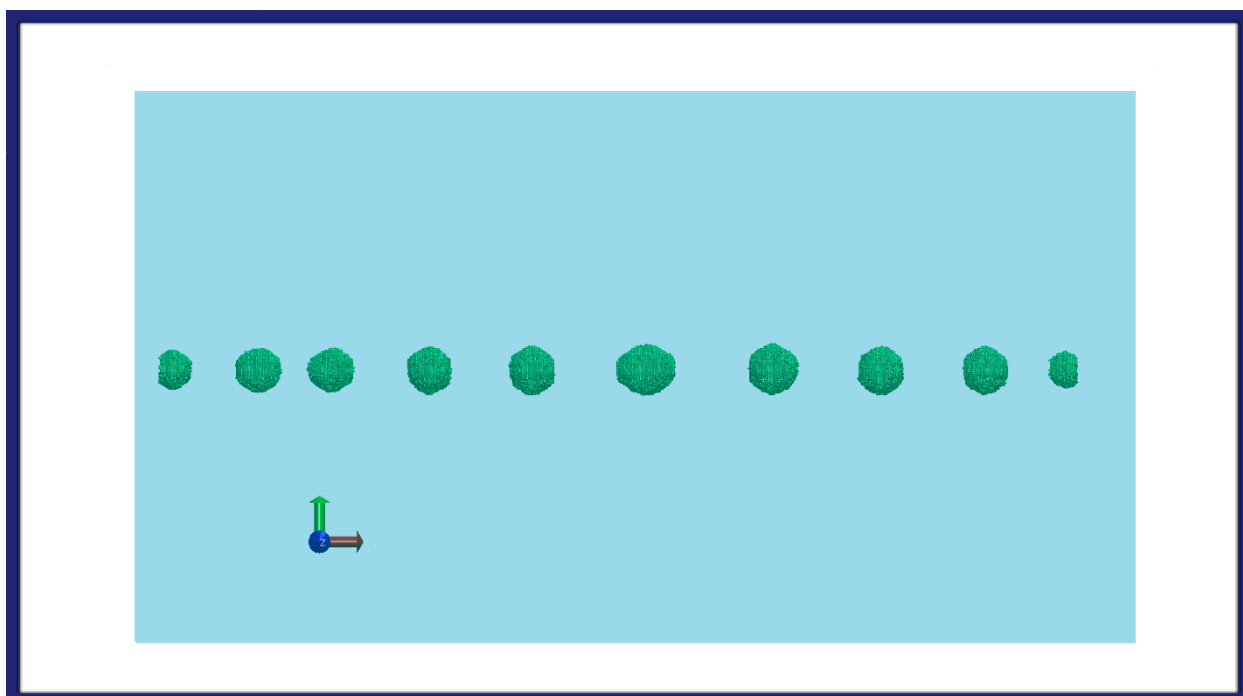


Рисунок 3.3.3.6 – зображення ланцюжка наночастинок, що утворилися в процесі розпаду нанодроту, напрямком осі  $[100]$ , контрольні значення системи  $\alpha =$

0,9 та  $p = 0,725$ . Режим «без пару». Зображення відповідає 219 кроку в циклі програми.

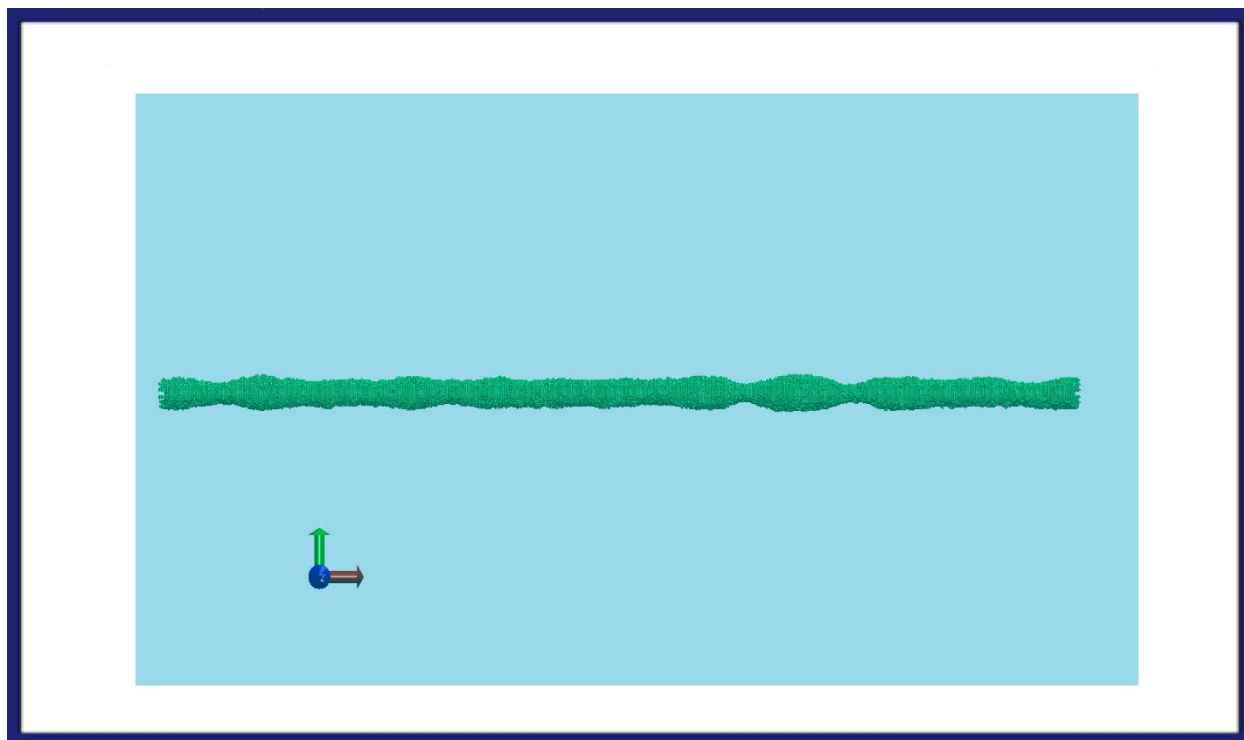


Рисунок 3.3.3.7 – зображення нанопроводу з вираженими збуреннями поверхні, напрямком  $[100]$  з контрольними значеннями  $\alpha = 0,9$  та  $p = 0,725$ . Режим «з паром». Зображення відповідає 100 кроку в циклі програми.

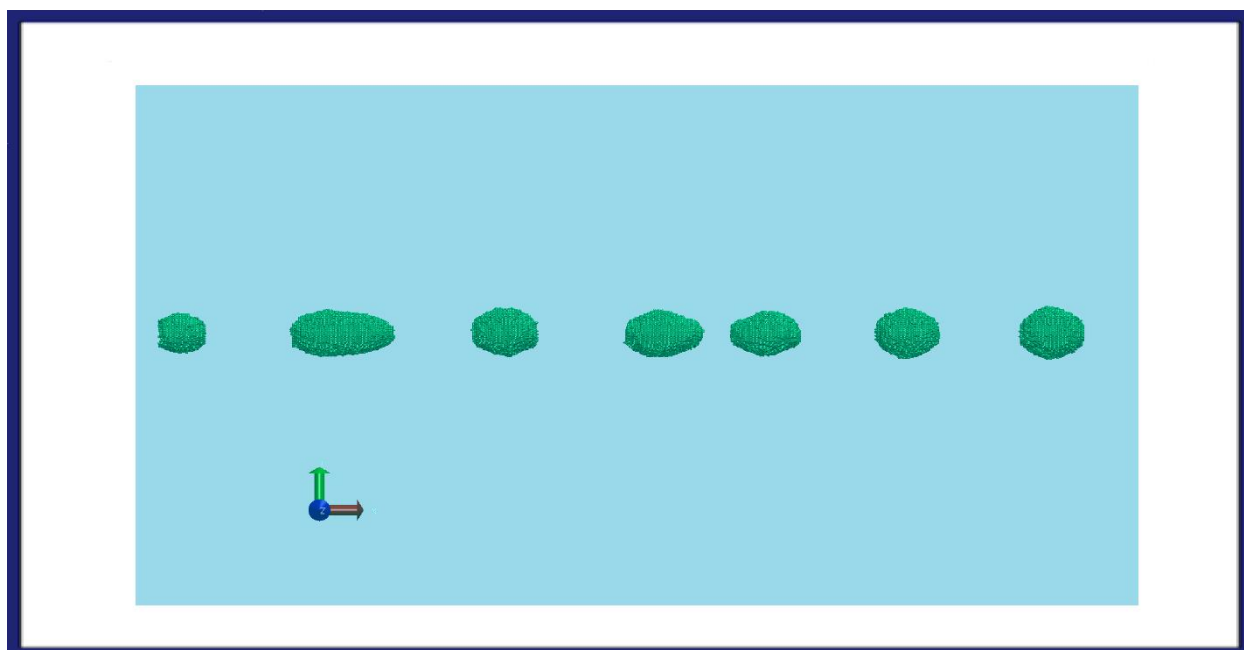


Рисунок 3.3.3.8 – зображення ланцюжка наночастинок, що утворилися в процесі розпаду, напрямом осі [100], контрольні значення системи  $\alpha = 0,9$  та  $p = 0,725$ . Режим «з паром». Зображення відповідає 200 кроку в циклі програми.

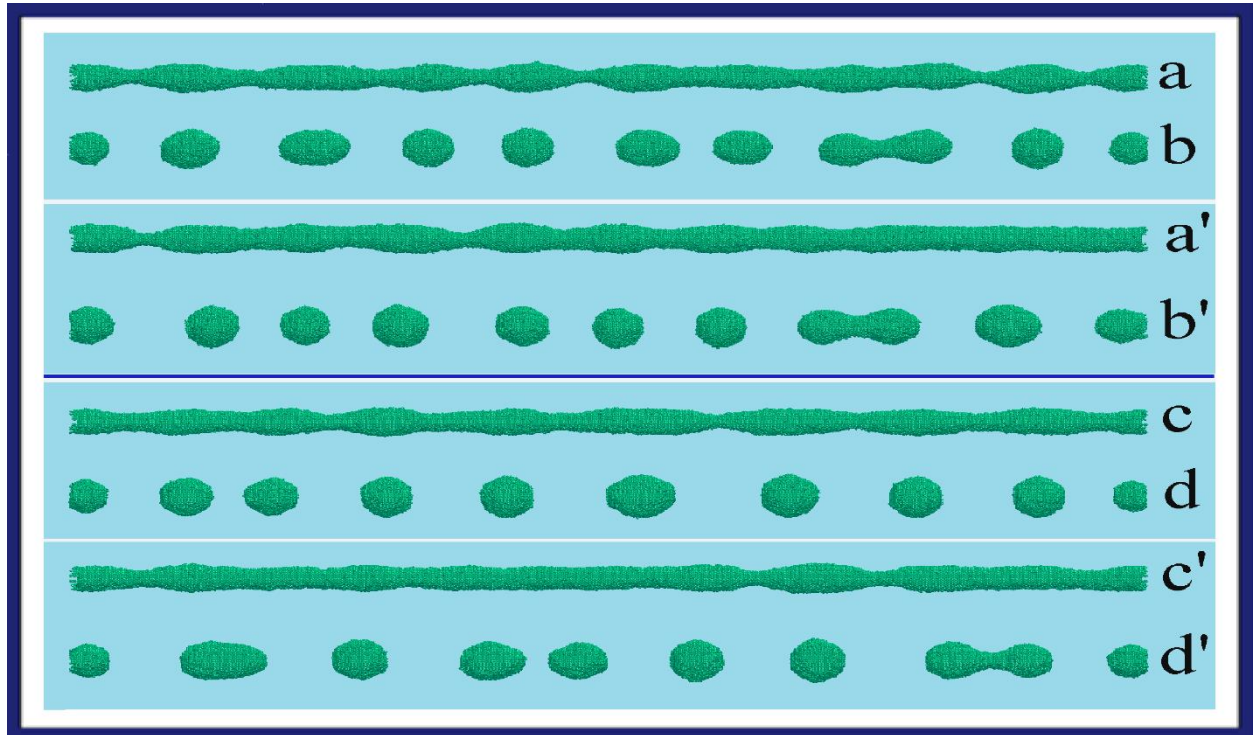


Рисунок 3.3.3.9 – зображення нанопроводу та наночастинок, що утворилися в процесі розпаду, для кожного розглянутого випадку. Напрямок осі [100]. Літерами зі штрихом позначено режим «з паром», літерами без штрихів – «без пару». Картинка створена для порівняння результатів двох режимів з однаковими контрольними значеннями. **(a,b)** Динаміка нанопроводу в гарячому режимі з блокованим випаровуванням:  $\alpha = 0,8, p = 0,75, L = 1150$  (довжина дроту),  $d_0 = 30$  (діаметр дроту)  $\lambda/R_0 \approx 8.5$ . Нанодроти (a), (b) відтворені після  $t = 2$  та  $2.8 (\times 10^6)$  кроків моделі МК відповідно. **(a',b')** Розпад нанодроту [100] в гарячому режимі з випаровуванням:  $\alpha = 0,8, p = 0,75, L = 1150, d_0 = 30, \lambda/R_0 \approx 8.5$ . **(a''),(b'')** Нанодроти відтворені після  $t = 1.2$  та  $3.2 (\times 10^6)$  кроків моделі МК відповідно. **(c, d)** Динаміка нанодроту [100] в холодному режимі з блокованим випаровуванням:  $\alpha = 0,9, p = 0,725, L = 1150, d_0 = 30$  та  $\lambda/R_0 \approx 8.5$ . **(c), (d)** Конфігурація нанодроту відтворена після  $t = 2.4$  та  $4.38 (\times 10^6)$  кроків моделі МК відповідно. **(c', d')** Розпад нанодроту [100] в холодному режимі

з випаровуванням:  $\alpha = 0.9$ ,  $p = 0.725$ ,  $L = 1150$ ,  $d_0 = 30$  та  $\lambda/R_0 \approx 9$ . (c`), (d`) Конфігурація нанодроту відтворена після  $t = 1.6$  та  $4(\times 10^6)$  кроків моделі МК відповідно.

Характерними особливостями результатів моделювання динаміки атомів нанодроту орієнтацією  $[100]$  є той фактор, що при зміні режимів кількість крапель, що утворилася в результаті розпаду не змінюється. Для  $\alpha = 0.8$  кількість частинок як для режиму «з паром», так і «без пару» – 8. Для  $\alpha = 0.9$  аналогічно – 8, якщо вважати, що «гантелі» (про злиття двох краплинок говорилося вище) в режимі «пару» розпадуться на дві окремі частинки. З затратою машинного часу даний випадок подібний до обрахунків розпаду нанопроводу з орієнтацією осі  $[001]$ .

### 3.3.4 Розпад дроту з орієнтацією $[111]$

Для чисельного обрахунку розпаду нанодротів вказаної орієнтації в моделі встановлюються наступні значення:  $\alpha = 1$ ,  $p = 0.7$  при низькій температурі,  $\alpha = 0.8$ ,  $p = 0.75$  при високій температурі – безрозмірні, термодинамічні параметри системи;  $L = 2000$  – довжина дроту в умовах низької температури,  $L = 1150$  – в умовах високої температури.

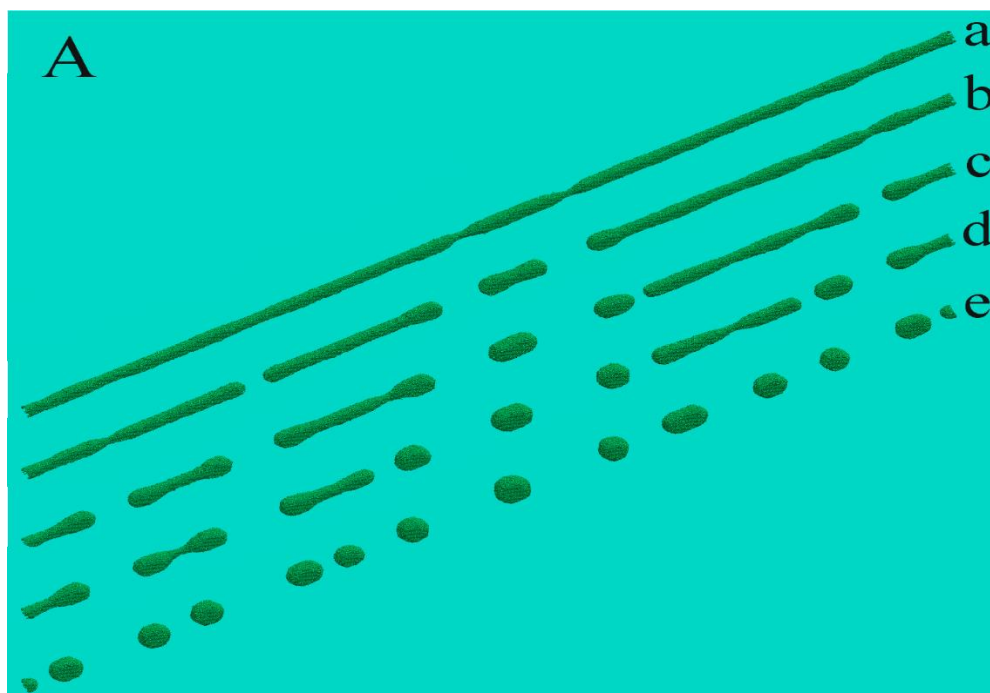


Рисунок 3.3.4.1 – динаміка нанопроводу [111] при низькій температурі з блокованим випаровуванням:  $\alpha = 1$ ,  $p = 0.7$ ,  $L = 2000$ ,  $d_0 = 28$  і  $\lambda/R_0 \approx 11.9$ . Початковий нанопровід містить  $N_0 = 216,1 \times 10^3$  атомів. (a), (b), (c), (d), (e) показують, відповідно, конфігурації нанодроту після  $t = 8$ ; 10; 12; 13.2 та 15.2 ( $\times 10^6$ ) кроків моделі МК. Ланцюжок нанокраплин, який утворився, відповідає 400 кроку в циклі моделі МК.  $\alpha = 1$ ,  $p = 0.7$ ,  $L = 2000$ ,  $d_0 = 28$   $N_0 \approx 216,1 \times 10^3$ , позначення А відповідає за режим «без пару»

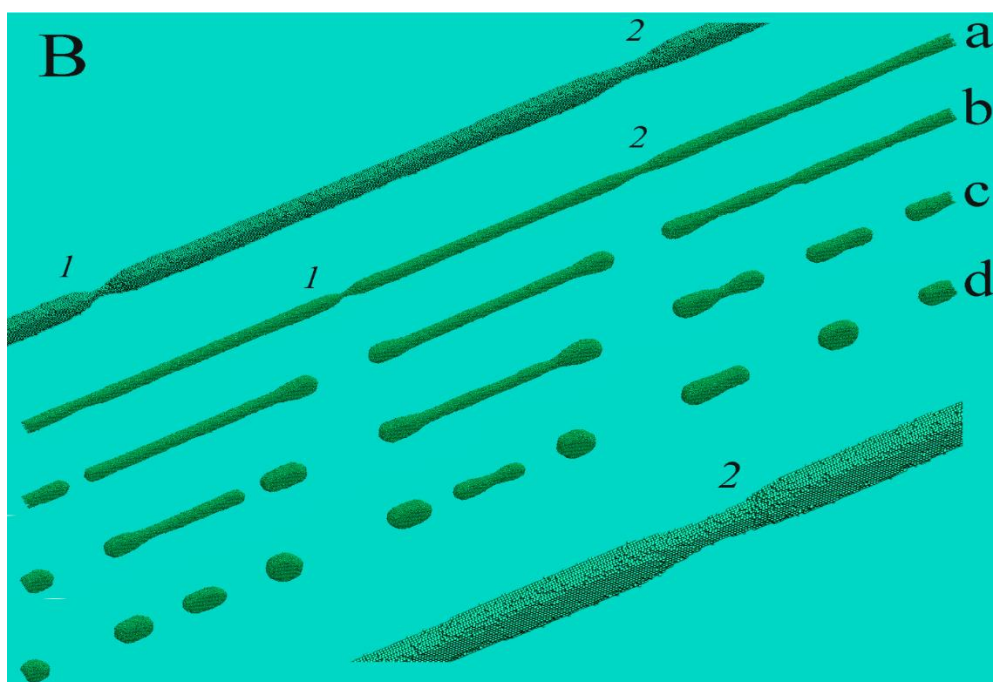


Рисунок 3.3.4.2 – динаміка нанопроводу [111] при високій температурі з випаровуванням:  $\alpha = 0,8$ ,  $p = 0.75$ ,  $L = 1150$ ,  $d_0 = 30$  і  $\lambda/R_0 \approx 11.9$ . Початковий нанопровід містить  $N_0 = 216,1 \times 10^3$  атомів.  $N_T \approx 215.8 \times 10^3$ -число атомів, що стало. (a), (b), (c), (d), (e) показують, відповідно, конфігурації нанодроту після  $t = 13,2; 16; 19$  та  $22 (\times 10^6)$  кроків моделі МК. Ланцюжок нанокраплин, який утворився, відповідає 660 кроку в циклі моделі МК  $\alpha = 0,8$ ,  $p = 0.75$ ,  $L = 1150$ ,  $d_0 = 30$   $N_0 \approx 216,1 \times 10^3$ , позначення В відповідає за режим «з паром». У верхній вставці зображена збільшена частина сегмента нанопроводу між областями перешийків 1 та 2. Структура області перешийку (відмічена 2) показана в нижній вставці.

### **Висновки до III -го розділу**

В даному розділі наведені результати атомістичного моделювання розпаду нанодротів. Для кожного з розглянутих випадків створена картинка з відповідними даними, які були отримані в ході досліджень. Стабільність наноструктур досліджували за допомогою методу Монте-Карло, який добре підходить для імітації дифузії поверхневих атомів. Результати досліджень показали, що існує відмінність між класичною теорією. Методи моделювання, застосовані в цій роботі, спрямовані на обчислювальну простоту, щоб забезпечити швидке обчислення великої кількості потенційно цікавих ситуацій розпаду нанодротів. Слід проводити дифузійне моделювання і надалі, оскільки даний метод є чудовим аналогом експериментів щодо виявлення особливостей розриву дротів нанорозмірів, залежних від температури, часових інтервалів та інших характеристик. Результати досліджень дозволять зрозуміти, коли розрив бажаний, а коли його слід запобігти, що може бути корисним для створення приладів високої функціональності на основі нанотехнологій.

## ВИСНОВКИ

Основний висновок, який можна зробити на основі вищезазначених результатів, наступний. Фізичні фактори, що визначають різноманітні сценарії розпаду нанопроводів, залежні від температури, радіусу, типу матеріалу, можна якісно, але досить однозначно інтерпретувати на основі простої моделі Монте-Карло, що містить два безрозмірні термодинамічні параметри. Використовувана МК модель є мезоскопічною і тому в даний час обмежена тим, що вона може дати лише приблизний опис конкретних родових поведінок.

Для більш кількісного моделювання необхідно або підключити параметри моделі МК до результатів мікроскопічних досліджень, або експериментальних даних. По-справжньому мікроскопічне моделювання, в даний час не доступне без додаткових феноменологічних припущень в рамках молекулярної динаміки або інших підходів в цілому, які можуть відтворити кристалізацію, починаючи від утворення аморфних малоатомних ембріонів до їх зростання в кристали.

Динаміка розпаду нанодротів орієнтованих уздовж осі симетрії [100] відповідно характеризуються схожістю в довжинах хвиль,  $\lambda$ , розвинених модуляцій в порівнянні з класичною теорією Ніколса-Маллінза. Так, для даного випадку, шляхом комп'ютерного моделювання отримано значення  $\lambda/R_0 \approx 8.5$ , що близьке до класичних  $\lambda/R_0 \approx 9$ . Проте, динаміка розпаду нанодротів орієнтованих уздовж осей симетрії [010], [111] дає результати, що не відповідають традиційним уявленням про нестійкість. Так,  $\lambda/R_0$  для кожного з випадків дорівнює 15,3 та 11,2.

Причина такої невідповідності між отриманими результатами і результатами класичної моделі в тому, що модель Ніколса-Маллінза не враховувала роль власного пару нанодроту, утвореного атомами, що відірвалися з його поверхні. Саме транспорт вільних атомів від одних зон нанопроводу до інших істотно коригує динаміку розпаду. Дійсно, роль пара і анізотропія можуть іноді слабо позначатися на числі крапель і часу розпаду в деяких випадках (як,



наприклад, для орієнтації осі  $[100]$ ), проте ці результати визнати узагальнюючими, базисними. В проведеній роботі для кожного з встановленого випадків з'ясовано час остаточного розпаду нанодроту. Дріт, встановлений у напрямку осі OZ, розпадався найдовше, що ще раз підтверджує те, що процес розпаду наноструктури залежить від орієнтації проводу у просторі. Окрім цього, досліджено еволюцію структури у місцях розриву. Як правило, більшість збурень на поверхні з часом переходили у окремі нанокраплини, або ж, в окремих випадках, у фрагменти, що за своєю формою нагадують гантелі— так звані андулоїди та інші неізомерні структури. Такі фрагменти виявилися доволі стійкими і можуть довгий час не розпадатися. Проте, в кінці-кінців, такі андулоїди або зливаються в єдину краплину, яка за розмірами є дещо більшою від інших, або ж розпадаються на більш дрібні фрагменти.

В результаті проведених досліджень з'ясовано, що існуюча теорія є недосконалою і не може цілісно описати картину процесів розпаду нанодротів. Класична теорія не враховує роль пару, який в окремих випадках впливає на значні відмінності в результатах відносно «класичних». Дані експерименту можуть бути використані в подальшому для порівняння з результатами, отриманими експериментально, стати в протигагу класичні теорії. Окрім цього, результати досліду показують, як розпад нанодроту залежить від змін термодинамічних параметрів. Ці знання можуть виявитися корисними для забезпечення нормального функціонування пристроїв на основі нанодротин та ланцюгів з наночастинок.

## СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. А. Л. Клавсюк Моделирование процесса формирования металлических наноконтактов методом молекулярной динамики [Электронный ресурс] / А. Л. Клавсюк, С. В. Колесников, Е. М. Смелова, А. М. Салецкий // Физика твердого тела, 2011, том 53, вып. 11 – Москва – Режим доступа до журн.: <http://journals.ioffe.ru/articles/viewPDF/1636>
2. Айщ М. М. Исследование особенностей деформации и разрушения нановолокон металлов и сплавов в зависимости от их формы и размеров: дис. ... кандидата фізмат. наук: 01.04.07 / Айщ Мохаммед Махмуд Мохаммед. – Барнаул, 2014.
3. A.R Setoodeh Computational Material science / A.R Setoodeh, H Attariani, M.Khosrownjad / 44 (2008) 378-384.
4. Christopher R. Journal of Materials Chemistry / Christopher R.Weinberger and Wei Cai / 2012, Lett 22, 3277.
5. Chi Yan Tang Computational Material Science / Chi Yan Tang, L.C.Z Hang, Kausala Mylvaganam / Lett 51 (2012) 117-121.
6. J. Bürki Physical Review Journals / J. Bürki, C. A. Stafford, D. L. Stein / Lett 95 (2005), 090601 Doi:10.1002/adma.200390087.
7. A. Bietsch Journal of Applied Physics / A. Bietsch, B. Michel / Lett, 80 (2002), 3346.
8. Subramanian K. R. Physical Review Journals / Subramanian K. R. S. Sankaranarayanan, Venkat R. Bhethanabotla and Babu Joseph Lett 76(2007), 134117.

9. J. K. Dora Mechanical properties of Pd, Pt and its alloy nanowires studied by molecular dynamics simulations / Rourkela-769008, India 2014A. В. Ченцов Разработка дискретно-континуальных моделей деформирования и разрушения наноматериалов дис. ... кандидата фізмат. наук: 01. 02. 04 / А. В. Ченцов. – Москва, 2008.
10. V. Gorshkov Diffusive growth of metallic nano-particles: numerical investigations and different shape formation rules. / V. Gorshkov, V. Privman, A. Zavalov // Langmuir 25 (14):7940-53 · July 2009.
11. В. В. Сингаївський Динаміка атомів нанокластерів з гексагональною ґраткою. / Science without boundaries International internet conference // “Інноваційні вектори розвитку сучасних наукових досліджень”. – Kharkiv, Ukraine, October 11, 2019.
12. С.В. Горобець Функціональні біо- та наноматеріали медичного призначення / С.В. Горобець, О.Ю. Горобець, П.П. Горбик, І.В. Уварова / Київ 2018 ст. 17 УДК 621.762+539.1.074+539.2.621-022.532 Ф947
13. Ярцев И.К. О взаимосвязи гидрофобности покрытий на поверхности стали и их защитных свойств и о роли наноструктурных добавок / Ярцев И.К., Плескунов В.Н., Федосеева М.С., Сырков А.Г. // Цветные металлы. - 2005. - С.36-40. - Библи.: 12 назв.
14. Власов Д.В. О плазмонном резонансе в наносфере / Зуев В.С., Францессон А.В., Зуева Г.Я., Власов Д.В. // Оптика и спектроскопия. - 2004. - Т.96, N 3. - С.472-476. - Библиогр.: 14 назв.
15. Варфоломеев А.Е. О применение полимерных нанокомпозитов в качестве болометров / Варфоломеев А.Е., Волков А.В., Зарецкий Д.Ф. и др. // Письма в ЖТФ. - 2004. - Т.30, вып.16. - С.1-6. - Библиогр.: 7 назв.

16. Еремеев В.А. Об определении собственных частот нанообъектов / Еремеев В.А., Иванова Е.А., Морозов Н.Ф., Соловьев А.Н. // Докл. АН. - 2006. - Т.406, N 6. - С.756-759. - Библиогр.: 11 назв.
17. Волынский А.Л. Об оценке прочности твердых тел в слоях нанометрового диапазона / Волынский А.Л., Моисеева С.В., Ярышева Л.М., Бакеев Н.Ф. // Докл. АН. - 2006. - Т.409, N 1. - С.64-65. - Библиогр.: 10 назв.
18. Петрунин В.Ф. Образование высокотемпературных фаз в наночастицах диоксида циркония / Петрунин В.Ф., Попов В.В., Чжу Хунчжи, Тимофеев А.А. // Инж. физика. - 2003. - N 4. - С.2-6. - Библиогр.: 11 назв.
19. Казакевич П.В. Образование наночастиц меди и латуни при лазерной абляции в жидкости / Казакевич П.В., Воронов В.В., Симакин А.В., Шафеев Г.А. // Квантовая электроника. - 2004. - Т.34, N 10. - С.951-956. - Библиогр.: 17 назв. 132
20. Обсуждение [темы "Наноструктуры и нанотехнологии"] // Вестн. РАН. - 2003. - Т.73, N 5. - С.429-449.
21. Обухов И.А. О возможности применения СТМ-АСМ литографии для создания новых типов квантовых приборов // Микросистемная техника. - 2003. - N 6. - С.34- 37. - Библиогр.: 6 назв.
22. Оглезнева С.А. Порошковые метастабильные стали с нанокристаллическими элементами структуры // Металлы. - 2005. - N 5. - С.49-58. - Библиогр.: 28 назв.
23. Огнев А.В., Воробьев Ю.Д., Чеботкевич Л.А. Магнитная анизотропия нанокристаллических  $\text{Co} / \text{Cu} / \text{Co}$  пленок // Физика металлов и металловедение. - 2004. - Т.97, N 6. - С.47-52. - Библиогр.: 9 назв.
24. Оликевич А., Свидиненко Ю. Российский наноурожай // Что нового в науке и технике. - 2004. - N 12(26). - С.40-51.

25. Оликевич А.А. Эволюция деловой разведки и контрразведки в эпоху нанотехнологий // Защита информации. Конфидент. - 2004. - N 4(58). - С.56-59.
26. Валах М.Я. Особенности роста самоиндуцированных SiGe наноостровков на SiGe буфере / Валах М.Я., Джаган В.Н., Красильник З.Ф. и др. // Нано- и микросистемная техника. - 2005. - N 6. - С.8-13. - Библиогр.: 16 назв.
27. Caricatoa A.P., Baruccab G., Di Cristoforob A. et. al. Excimer pulsed laser deposition and annealing of YSZ nanometric films on Si substrates // Applied Surface Science, 2005. V. 248. P.270-275.
28. І. С. Чекман Англо-український словник-довідник з нанонауки / І. С. Чекман, С. О. Радзієвська – К.: Задруга, 2013. – 296 с. – Бібліогр.: с. 165–261.
29. Baruccab G. Excimer pulsed laser deposition and annealing of YSZ nanometric films on Si substrates / Caricatoa A.P., Baruccab G., Di Cristoforob A. et. al. // Appl. Surf. Sc., 2005. V. 248. P.270-275. 133
30. Kamanin A.V. Surface control of cooperative phenomena in nanostructured materials with quantum dots./ Ivanov S.V., Gladyshev A.G., Kamanin A.V., Kolmakov A.G., et al. // Phys.stat.sol.(c), 2005. V.2. №6. P.1912-1916.
31. Herr U. Trans.Jap. Inst. Met.Suppl./ Birringer R., Herr U., Gleiter H. Trans. // 1986, v. 27, p. 43–52.
32. Громов В.Е. Нано: структуры, материалы, технологии. / Будовских Е.А., Громов В.Е., Загуляев Д.В. //Новокузнецк. Изд-во НПК. 2010, 201 с
33. Я.А. Верещагина Физическая химия наноматериалов [Электронный ресурс] / Учебное пособие - Казань 2016, УДК 544 – Режим доступа до ресурсу: [https://dspace.kpfu.ru/xmlui/bitstream/handle/net/108104/Ucheb\\_posobie\\_FHNM\\_elektronnoe.pdf?sequence=1&isAllowed=y](https://dspace.kpfu.ru/xmlui/bitstream/handle/net/108104/Ucheb_posobie_FHNM_elektronnoe.pdf?sequence=1&isAllowed=y)

34. Mansoori, G. Nanotechnology. An introduction for the Standards Community / Mansoori, G.; Fauzi Soelaiman, T. // *J. ASTM Int.* 2005, 2, 1–22.
35. Gnach, A. Upconverting nanoparticles: Assessing the toxicity/ Gnach, A.; Lipinski, T.; Bednarkiewicz, A.; Rybka, J.; Capobianco, J.A. // *Chem. Soc. Rev.* 2015, 44, 1561–1584.
36. Samer Bayda The History of Nanoscience and Nanotechnology: From Chemical–Physical Applications to Nanomedicine/ Samer Bayda, Muhammad Adeel, Tiziano Tuccinardi, Marco Cordani, Flavio Rizzolio // *Molecules* 2020, 25(1), 112
37. Hulla, J. Nanotechnology/ Hulla, J.; Sahu, S.; Hayes, A. // *Hum. Exp. Toxicol.* 2015, 34, 1318–1321.
38. Hulla J. Nanotechnology. *Hum. Exp. Toxicol.*/ Hulla, J.; Sahu, S.; Hayes, A. // 2015,34, 1318–1321.
39. Anna P. N. Nanotechnology and its Applications in Medicine/ Anna Pratima Nikalje, Y.B. Chavan, Rauza Bagh // *Medicinal chemistry* 2015, Nikalje, Med chem 2015.
40. Griffith M. Nanotechnology in stem cells research: advances and applications/ Deb K. D., Griffith M., Muinck E. D., Rafat M. // *Front Biosci (Landmark Ed)* 2012, 17: 1747- 1760
41. Loubaton B. Nanomedicine, nanotechnology in medicine/ Boisseau P., Loubaton B. // *Comptes Rendus Physique*, 2011, Lett. 12: 620-636.
42. McGuire T. Small-scale systems for in vivo drug delivery/ LaVan D. A., McGuire T., Langer R. // *Nat Biotechnol*, 2003, Lett. 21: 1184-1191.
43. Y. Kumarasamy NanoTechnology in Mechanical Engineering – Case study/ Y. Kumarasamy, K. Ganesan // *Research Gate*, March 2015, – [Электронный ресурс] – режим доступа: <https://cutt.ly/CykgpUR>

44. Magy Mohamed Kandil The role of nanotechnology in electronic properties of materials/ Technical Report, Research Gate, June 2016, – [Електронний ресурс] – режим доступу: <https://cutt.ly/OykgdiE>
45. "Nanotechnologies for biomolecular detection and medical diagnostics"/ Mark Ming-Cheng, Cuda, Giovanni Bunimovich, Yuri L., Gaspari Marco, James R., Hill and Haley D., Chad A, Nijdam A., Terracciano Rosa // Current Opinion in Chemical Biology, 2006, PMID 16418011. [Електронний ресурс] – режим доступу: <https://cutt.ly/5ykjhC5>
46. В. А. Шахнов Нанотехнологическая информатика – направление развития информационных технологий/ В. А. Шахнов, Л. А. Зинченко // Информационные технологии и вычислительные системы 3. – 2012. – ст. 3
47. Ferric C. Application of nanotechnologies in the energy sector: A brief and short review/ Ferric Christian, Edith, Selly, Dendy Adityawarman, Antonius Indarto // Front. Energy. – 2013. – 7(1): 6–18DOI 10.1007/s11708-012-0219-5
48. Noriko A. Rough–Smooth Transition of Step and Surface / Noriko Akutsu, Takao Yamamoto // Handbook of Crystal Growth (Second Edition), 2015
49. Gorshkov V. N. Restructuring and Breakup of Nanowires with the Diamond Cubic Crystal Structure into Nanoparticles / Vyacheslav N. Gorshkov, Vladimir V. Tereshchuk and Pooya Sareh // Nanoware: anisotropic initial reshaping and breakup dynamic, 2019
50. Венгреневич Р.Д. Розподіл острівців за розмірами в умовах дислокаційноповерхневої дифузії / Венгреневич Р.Д., Москалюк А.В., Іванський Б.В., Стасик М.О // Фізика і технологія тонких плівок та наносистем, Том 1, Івано-Франківськ, 2009, ст. 35 – 36


51. Nichols F. A. and W. W. Mullins, Surface- (Interface-) and Volume-Diffusion Contributions to Morphological Changes Driven by Capillarity, Trans. Metallurgical Soc. AIME 233, 1840–1947 (1965).
52. Бондаренко В. В. Дослідження атомістичним методом Монте-Карло нестійкості нанодротинок на контактах з'єднань / В.В. Бондаренко, Я.Ю. Осипенко, М.О. Пасічний, Т.В. Запорожець // Серія «Фізико-математичні науки», 2012. – PACS 66.30.Pa. – ст. 47.
53. Tu K.N. Hollow nanostructures based on the Kirkendall effect: Design and stability considerations / Tu K.N., Gösele U. // Applied Physics Letters, 2005. – lett. 85.
54. Tokozakura D. Shrinking of hollow Cu<sub>2</sub>O and NiO nanoparticles at high temperatures / Nakamura R., Nakajima H., Lee J.-G., Tokozakura D., Mori H. // Acta Materialia, 2008, lett. 55.
55. Gorshkov V. N. Kinetic Monte Carlo Model of Breakup of Nanowires into Chains of Nanoparticles / Vyacheslav Gorshkov and Vladimir Privman // J. Appl. Phys. 122 (20), Article 204301, 10 pages (2017)
56. Karim S. Morphological evolution of Au nanowires controlled by Rayleigh instability / Karim S., Toimil-Molaes M.E., Balogh A.G., Ensinger W., Cornelius T.W., Khan E.U., Neumann R. // Nanotechnology, 2006, P. 5954-5959.
57. Мітельов А.В. Моделювання фізичних процесів в магнетронних розпилювальних системах / Мітельов А.В. // Магістерська дисертація. – Київ. – 2018. – С. 11 – 12.
58. Беленкова О. А. Моделирование как метод научного познания и инструмент решения технических проблем / Надыров А. И., Беленкова О. А. // Международный научно-исследовательский журнал. – 2016. – №. 12-2. – С. 157-158



59. Бутенко Н. С. Обзор методов компьютерного моделирования наноструктур / Бутенко Н. С., Жаркова О. М. // Краснодар. – 2017. – С. 5-8
60. А. М. Попов Моделирование наносистем и наноэлектроника / Попов А. М. // Comp. nanotechnol., – Москва. – 2014, № 1, 6–10
61. Моделирование методами монте-карло / Основы компьютерного моделирования наносистем // [Электронный ресурс]. – режим доступа: <https://ozlib.com/802914/matematika /modelirovanie metodami monte karlo>

## ДОДАТКИ

### Перевірка текстової частини магістерської дисертації на наявність плагіату



Власник документу:  
Чижська Тетяна Григорівна

Дата перевірки:  
07.05.2020 12:52:49 EEST

Дата звіту:  
07.05.2020 12:54:42 EEST

ID перевірки:  
1002829264

Тип перевірки:  
Doc vs Internet + Library

ID користувача:  
77188

Назва документу: Сингаївський В. В. перевірка на плагіат

ID файлу: 1002843112   Кількість сторінок: 41   Кількість слів: 8039   Кількість символів: 63936   Розмір файлу: 79.53 KB

### 0.82% Схожість

Найбільша схожість: 0.3% з джерело <https://studfile.net/preview/3272015>

0.44% Схожість з Інтернет джерелами

2

Page 43

0.52% Текстові збіги по Бібліотеці акаунту

3

Page 43

### 0% Цитат

Не знайдено жодних цитат

### 0% Вилучень

Вилучений текст відсутній

### Підміна символів

Заміна символів

29